

UNIVERSIDAD NACIONAL DE CÓRDOBA  
FACULTAD DE CIENCIAS EXACTAS, FÍSICAS Y NATURALES

Tesis Doctoral



Modelado computacional,  
termomecánico-metalúrgico, del tratamiento  
de austemperizado de una fundición nodular

Autor: Adrián Dante Boccardo  
Directora: Patricia Mónica Dardati

Marzo de 2017



# Modelado computacional, termomecánico-metalúrgico, del tratamiento de austemperizado de una fundición nodular

*por*

Adrián Dante Boccardo

## **Directora**

Patricia Mónica Dardati

Facultad Regional Córdoba, Universidad Tecnológica Nacional, Córdoba, Argentina.

## **Comisión Asesora**

Diego Javier Celentano

Pontificia Universidad Católica de Chile, Santiago de Chile, Chile.

Luis Augusto Godoy

Facultad de Ciencias Exactas, Físicas y Naturales, Universidad Nacional de Córdoba,  
Córdoba, Argentina.

*Esta Tesis fue enviada a la Facultad de Ciencias Exactas, Físicas y Naturales de la  
Universidad Nacional de Córdoba para cumplimentar los requerimientos de obtención  
del grado académico de Doctor en Ciencias de la Ingeniería.*

Córdoba, Argentina

Marzo de 2017





**ACTA DE EXAMENES**

Libro: 00001 Acta: 03793 Hoja 01/01  
LLAMADO: 1 10/03/2017  
CATEDRA - MESA:

DI002 TESIS DOCTORADO EN CIENCIAS DE LA INGENIERIA

NUMERO	APELLIDO Y NOMBRE	DOCUMENTO	INGRESO	COND.	NOTA	FIRMA
33354688	BOCCARDO, ADRIAN DANTE	DNI: 33354688	2012	T	Aprobado	<i>ADB</i>

CISILINO, Adrián - FACHINOTTI, Víctor - SÁNCHEZ, Pablo - OLDANI, Carlos - GIUSTI, Sebastián -

Observaciones:

Córdoba, \_\_\_/\_\_\_/\_\_\_.

Certifico que la/s firma/s que ha/n sido puesta/s en la presente Acta pertenece/n a: *Adrián Cisilino*

1 0 1 0 1  
Inscriptos Ausentes Examinados Reprobados Aprobados  
07/03/2017 11:09:16

Libro/Acta: 0000103793 Hoja: 01/01



*A mi padre*  
*José Mario*



# Prefacio

Declaro que este trabajo es de mi autoría, y hasta donde yo sé y entiendo, no contiene material previamente publicado o escrito por otra persona, ni material que de manera substancial haya sido aceptado para el otorgamiento de cualquier otro grado o diploma.

Parte de este trabajo ha sido presentado en:

*Trabajos en congresos y reuniones científicas:*

Implementación de un modelo de solidificación de fundición nodular en un programa de elementos finitos para propósitos generales. Francisco J. Rodríguez, Adrián D. Boccardo, Patricia M. Dardati, Fernando D. Carazo, Diego J. Celentano y Luis A. Godoy. MECOM 2012, X Congreso Argentino de Mecánica Computacional, llevado a cabo en Salta, Argentina, año 2012. *Mecánica Computacional*, Vol. XXXI, pp. 2093-2118.

Modelado computacional del tratamiento térmico de austemperizado de una fundición de hierro nodular. Adrián D. Boccardo, Patricia M. Dardati, Diego J. Celentano y Luis A. Godoy. SAM CONAMET 2013, 13er congreso internacional en ciencia y tecnología de metalurgia y materiales, llevado a cabo en Puerto Iguazú, Argentina, año 2013.

Simulación del tratamiento térmico para la obtención de fundición dúctil austemperizada. Adrián D. Boccardo, Patricia M. Dardati, Diego J. Celentano y Luis A. Godoy. V Workshop sobre Modelado Multiescala de Materiales, llevado a cabo en Córdoba, Argentina, año 2014.

## *Prefacio*

Numerical simulation of dimensional change during austempering heat treatment in ductile cast iron. A.D. Boccardo, A.D. Sosa, M.D. Echeverría, P.M. Dardati, D.J. Celentano and L.A. Godoy. International Symposium on the Science and Processing of Cast Iron (SPCI 10), llevado a cabo en Mar del Plata, Argentina, año 2014.

Computation of effective coefficient of thermal expansion of nodular cast iron. Francisco J. Rodríguez, Adrián D. Boccardo, Patricia M. Dardati, Diego J. Celentano and Luis A. Godoy. 1st Pan-American Congress on Computational Mechanics - PANACM 2015, llevado a cabo en Buenos Aires, Argentina, año 2015.

Análisis de sensibilidad de modelos matemáticos. Adrián D. Boccardo, Nestor D. Barulich, Patricia M. Dardati y Diego J. Celentano. ENIEF 2016, XXII Congreso sobre Métodos Numéricos y sus Aplicaciones, llevado a cabo en Córdoba, Argentina, año 2016.

### *Artículos en revistas científicas:*

Numerical simulation of austempering heat treatment of a ductile cast iron. Adrián D. Boccardo, Patricia M. Dardati, Diego J. Celentano, Luis A. Godoy, Marcin Górný and Edward Tyrała. *Metallurgical and Materials Transactions B*, 2016, Vol. 47, Num. 1, pp. 566-575, DOI 10.1007/s11663-015-0511-y.

A microscale model for ausferritic transformation of austempered ductile irons. Adrián D. Boccardo, Patricia M. Dardati, Diego J. Celentano and Luis A. Godoy. *Metallurgical and Materials Transactions A*, 2017, Vol. 48, Num. 1, pp. 524-535, DOI: 10.1007/s11661-016-3816-9.

---

Adrián D. Boccardo

# Agradecimientos

Quiero expresar especial agradecimiento a mi directora de tesis Patricia Dardati y a los miembros de mi comisión asesora de tesis Luis Godoy y Diego Celentano por el inmenso apoyo brindado.

Agradezco a CONICET, Argentina, por haberme otorgado una beca de doctorado para realizar el presente estudio; como así también al departamento de Ingeniería Mecánica de la Universidad Tecnológica Nacional-Facultad Regional Córdoba, Argentina, por haberme provisto de un lugar de trabajo. Agradezco la ayuda económica recibida del Ministerio de Ciencia y Tecnología de la provincia de Córdoba, Argentina, en el marco del proyecto “Análisis computacional de comportamiento termo-mecánico de materiales con aplicación a la industria automotriz” y de la Universidad Tecnológica Nacional, Argentina, en el marco del proyecto “Modelado computacional del tratamiento térmico para la obtención de fundición dúctil austemperizada (ADI)”.

Agradezco a mis familiares, especialmente a mi madre Aida, a mi abuela María Clementina, a mi compañera de vida Tamara y a mis hermanos por haberme apoyado y comprendido en momentos de intenso trabajo.

Agradezco a mis amigos Darío Barulich y Francisco Rodriguez por el apoyo brindado tanto en lo académico como en lo personal, como así también a mis compañeros de oficina Javier Salomone, Sebastián Giusti y Juan Lopensino por toda la ayuda prestada dentro del grupo de investigación y desarrollo en mecánica aplicada, GIDMA, Universidad Tecnológica Nacional-Facultad Regional Córdoba, Argentina.

Agradezco a Marcin Górný y Edward Tyrała de la Facultad de Ingeniería de Fundición, AGH Universidad de Ciencia y Tecnología, Polonia, por haberme facilitado el material necesario para realizar la validación del modelo propuesto en éste trabajo. Agradezco también a Ramón Suarez y Susana Mendez, IK4 Azterlan, España, cuyos trabajos me fueron muy útiles para el desarrollo de la tesis.



## Resumen

**Palabras claves:** fundición de hierro nodular austemperizada, tratamiento térmico de austemperizado, modelado computacional.

La fundición de hierro nodular austemperizada es una aleación metálica cuya microestructura, obtenida a través del tratamiento térmico de austemperizado, está compuesta por nódulos de grafito embebidos en una matriz ausferrítica. La buena relación entre propiedades mecánicas y costo de las piezas realizadas en este material lo posicionan como una excelente opción para la fabricación de autopartes y agropartes. El tipo de microestructura y las variaciones de las dimensiones de la pieza, al final del austemperizado, dependen de numerosos factores, entre ellos algunos parámetros del tratamiento térmico. La selección adecuada de los valores de todos los factores involucrados no es sencilla, especialmente cuando la pieza presenta una geometría compleja. De aquí la necesidad de contar con nuevas herramientas de diseño, que superen a las técnicas tradicionales, y permitan agilizar y reducir los costos de desarrollo de nuevas piezas. En esta tesis se predice la evolución de la temperatura, de las deformaciones y de la microestructura, en los distintos puntos de una pieza de fundición de hierro nodular, cuando ésta es sometida a un tratamiento térmico de austemperizado *de tres pasos*, considerándose las principales variables del proceso. Para ello se propone un nuevo modelo termo-mecánico-metalúrgico multiescala. El aspecto termomecánico se plantea en la escala macroscópica, escala de la pieza, y sus ecuaciones se resuelven por el método de los elementos finitos en el dominio espacial y por el método de las diferencias finitas en el dominio temporal. El aspecto metalúrgico es planteado en la escala microscópica, escala de los micro-constituyentes, representándose la microestructura por medio de elementos de volumen representativo. Para las transformaciones de fase consideradas se proponen nuevos modelos que consideran la nucleación, el crecimiento y la interacción de las fases presentes por medio de leyes determinísticas. Se realiza un estudio de sensibilidad del modelo basado en la varianza de la respuesta que permite conocer la influencia en el resultado de los diferentes factores del proceso, así como la interacción entre ellos. También se realiza la simulación de tratamientos térmicos de laboratorio, con las cuales se puede comprobar que el modelo, luego de un apropiado ajuste de sus constantes, puede representar correctamente los tiempos mínimos requeridos de tratamiento, las fracciones finales de fase y la evolución de la temperatura, de las dimensiones de la pieza y de la

## Resumen

microestructura. La investigación realizada y el modelo propuesto contribuyen al mejor entendimiento de los procesos que intervienen en el tratamiento de austemperizado de una fundición de hierro nodular y permiten afrontar de mejor manera tanto el diseño del ciclo térmico como el de la pieza a ser tratada.

## Abstract

**Keywords:** austempered ductile iron, austempering heat treatment, computational modeling.

Austempered ductile iron is a metal alloy, in which the microstructure is obtained by means of an austempering heat treatment, and results in graphite nodules embedded in an ausferritic matrix. Due to its good relation between mechanical properties and production costs of parts, the austempered ductile iron is an excellent choice for the manufacturing of autoparts and agroparts. At the end of the austempering, the characteristics of the microstructure and the changes in the part dimensions depend on several factors, such as heat treatment parameters. Selecting the values of all factors is not a simple task, especially when the geometry of the part is complex. Thus, it is very important for the designer to have new design tools to accelerate the development of new parts and reduce their cost. In this thesis the temperature, deformation and micro-structure evolutions, are predicted at different points of a part made of nodular cast iron, when it is subjected to a *three-step* austempering heat treatment, taking into account the main variables of the process. In order to do that, a new thermo-mechanical-metallurgical multi-scale model is proposed. The thermo-mechanical model addresses the macroscopic scale, which is the scale of the part, and the equations are solved by a finite element method in the spatial domain and a finite difference method in the time domain. The metallurgical model addresses the microscopic scale, which is the scale of the micro-constituents, in which the micro-structure is represented by representative volume elements. For the considered phase transformations, new models are proposed to account for nucleation, growth, and interaction of phases by means of deterministic laws. A variance-based sensitivity study is performed, which allows identifying the influence of factors and factor interactions. Simulations of laboratory heat treatments are performed, and following an appropriate parameter fitting, the minimum required time of heat treatment, final phase fractions, and temperature, part dimension, and micro-structure evolutions are adequately represented. The research performed in this thesis and the proposed model contribute to a better understanding of the different processes that take place in the austempering heat treatment and allow to address the design of the thermal cycle and the design of parts to be treated.

## Resumo

**Palavras chaves:** ferro fundido nodular austemperado, tratamento térmico austêmpera, modelagem computacional.

O Ferro fundido nodular austemperado é uma liga de metal cuja microestrutura, obtido através de um tratamento térmico de austêmpera, composto de nódulos de grafite e uma matriz ausferrítica. A boa relação entre as propriedades mecânicas e o custo das peças feitas deste material é posicionado como uma escolha excelente para a fabricação de autopeças e agropeças. O tipo de microestrutura e variações de dimensões da peça, o fim austemperado, dependem de inúmeros fatores, incluindo alguns parâmetros de tratamento térmico. A seleção adequada dos valores dos factores envolvidos não é simples, especialmente quando a peça tem uma geometria complexa. Assim a necessidade de ter novas ferramentas de desenho que superam as técnicas tradicionais, e para simplificar e reduzir os custos de desenvolvimento de novas peças. Nesta tese a evolução da temperatura, deformação e microestrutura, em diferentes pontos de uma peça de ferro fundido, quando submete-se a um tratamento térmico *de três passos*, considerando as principais variáveis processo. Assim sendo, é proposto um novo modelo termo-mecânico-metalúrgico multi-escala. O aspecto termomecânico é abordado na escala macroscópica, escala da peça, e suas equações são resolvidas pelo método dos elementos finitos no domínio espacial e o método de diferenças finitas no domínio do tempo. O aspecto metalúrgico é abordado na escala microscópica. A microestrutura é representada por elementos volume representativo. Nas transformações de fase, considera-se novos modelos de nucleação, crescimento e interação das fases com leis deterministas. Um estudo de sensibilidade baseada na variância da resposta é realizado para inferir a influência nos resultados dos diferentes factores no modelo do processo e a interação entre eles. Realiza-se, também, a simulação de tratamentos térmicos, visando-se verificar o modelo após o ajuste apropriado de suas constantes. O modelo pode representar corretamente os tempos mínimos de tratamento necessário, as frações de fase final as evoluções da temperatura, dimensões da peça e microestrutura. A investigação e o modelo proposto contribuem para uma melhor compreensão dos processos envolvidos no tratamento térmico de austêmpera de fundição de ferro dúctil e permitir um melhor desenho do ciclo térmico da peça a ser tratada.



# Índice general

Acta de aprobación	I
Dedicatoria	III
Prefacio	V
Agradecimientos	VII
Resumen	IX
Índice general	XIII
Índice de figuras	XVII
Índice de tablas	XXIII
Lista de símbolos	XXV
Abreviaturas	XXXI
<b>1. Introducción</b>	<b>1</b>
1.1. Contexto y motivación . . . . .	1
1.2. Importancia del problema . . . . .	3
1.3. Alcance del estudio . . . . .	3
1.4. Objetivos del estudio . . . . .	4
1.5. Metodología . . . . .	4
1.6. Contenidos de la tesis . . . . .	5
<b>2. Fundición de hierro nodular austemperizada</b>	<b>7</b>
2.1. Fundición de hierro nodular . . . . .	7
2.2. Fundición de hierro nodular austemperizada . . . . .	10
2.3. Tratamiento térmico de austemperizado . . . . .	12
2.4. Transformaciones de fase durante el TTA <i>de tres pasos</i> . . . . .	15

## Índice general

<b>3. Revisión bibliográfica de modelos</b>	<b>31</b>
3.1. Introducción . . . . .	31
3.2. Modelado computacional del TTA <i>de tres pasos</i> . . . . .	33
3.3. Necesidad de un nuevo modelo . . . . .	41
<b>4. Características generales del modelo TMM</b>	<b>43</b>
4.1. Introducción . . . . .	43
4.2. Interacción entre los problemas térmico, mecánico y metalúrgico . . . . .	44
4.3. Modelo termomecánico . . . . .	46
4.4. Modelo metalúrgico . . . . .	50
4.5. Estrategia de solución numérica . . . . .	53
<b>5. Modelos de cambio de fase propuestos</b>	<b>57</b>
5.1. Introducción . . . . .	57
5.2. Transformación eutectoide inversa . . . . .	57
5.3. Homogeneización austenita . . . . .	68
5.4. Transformación ausferrítica . . . . .	71
5.5. Transformación martensítica . . . . .	82
<b>6. Estudio de sensibilidad del modelo TMM</b>	<b>85</b>
6.1. Introducción . . . . .	85
6.2. Análisis de sensibilidad basado en la varianza . . . . .	86
6.3. Estudio de sensibilidad del modelo . . . . .	91
<b>7. Aplicación del modelo TMM</b>	<b>115</b>
7.1. Introducción . . . . .	115
7.2. Simulación de ensayos experimentales . . . . .	115
7.3. Caso de estudio . . . . .	127
<b>8. Conclusiones y líneas futuras de trabajo</b>	<b>133</b>
8.1. Principales desarrollos presentados en esta tesis . . . . .	133
8.2. Conclusiones . . . . .	134
8.3. Contribuciones originales . . . . .	137
8.4. Líneas futuras de trabajo . . . . .	137
<b>Bibliografía</b>	<b>139</b>
<b>Apéndice</b>	<b>149</b>
<b>Apéndice A. Propiedades de la fundición de hierro nodular</b>	<b>151</b>
A.1. Densidades de las fases . . . . .	151
A.2. Concentraciones de carbono de las fases . . . . .	153
A.3. Coeficientes de difusión de carbono en las fases . . . . .	154
A.4. Temperaturas . . . . .	154

A.5. Propiedades térmicas y mecánicas . . . . .	155
<b>Apéndice B. Ajuste del modelo de cambio de fase de la TA</b>	<b>157</b>
<b>Apéndice C. Implementación del modelo del TTA en Abaqus</b>	<b>159</b>
C.1. Descripción general de la implementación . . . . .	159
C.2. Entrada de datos . . . . .	160
C.3. Subrutinas desarrolladas . . . . .	161



# Índice de figuras

2.1. Clasificación de la fundición gris de acuerdo a la morfología del grafito y tipo de matriz metálica. . . . .	7
2.2. Proceso de enfriamiento de los tratamientos térmicos de recocido, normalizado, templado y austemperizado. . . . .	9
2.3. Fases de la microestructura de una fundición de hierro nodular austemperizada, con una matriz completamente ausferrítica. . . . .	10
2.4. Subunidades de ferrita superior e inferior. . . . .	11
2.5. Ciclo térmico del tratamiento de austemperizado <i>de tres pasos</i> . . . . .	13
2.6. Ciclo térmico del tratamiento de austemperizado <i>in situ</i> . . . . .	13
2.7. Microestructura de una fundición de hierro nodular con una matriz ausferrítica-martensítica. . . . .	15
2.8. Diagrama de las transformaciones de fase (a) CCT y (b) TTT. . . . .	17
2.9. Fundición de hierro nodular con matriz ferrítica-perlítica. . . . .	18
2.10. Isopleta del diagrama de fases <i>Fe-C-Si</i> estable (líneas sólidas) y metaestable (líneas de puntos) [Ghergu et al., 2012]. . . . .	19
2.11. Máxima energía libre disponible para la nucleación $\Delta G_m$ y mínima energía necesaria para obtener una cantidad detectable de ferrita $G_n$ , en función de la temperatura. . . . .	22
2.12. Energía libre de la austenita y de la ferrita en función de la concentración de carbono. . . . .	23
2.13. Temperatura de comienzo de la transformación ausferrítica. . . . .	24
2.14. Energía libre de la austenita y de la martensita en función de la temperatura. . . . .	28
2.15. Energía libre de la austenita (con y sin deformación plástica) y de la martensita en función de la temperatura. . . . .	29
4.1. Ciclo térmico modelado del tratamiento térmico de austemperizado <i>de tres pasos</i> . . . . .	44
4.2. Interacciones entre los problemas térmico, mecánico y metalúrgico. Las flechas con líneas continuas representan a las interacciones consideradas en esta tesis, mientras que las flechas con líneas de trazos representan a las no consideradas. . . . .	46
4.3. Diagrama de flujo del algoritmo del modelo metalúrgico. . . . .	51

## Índice de figuras

4.4.	Esquema de intercambio de información entre los dominios de la escala macroscópica y microscópica en el modelo termomecánico-metalúrgico.	53
4.5.	Diagrama de flujo del algoritmo para resolver el problema termomecánico-metalúrgico para un tiempo $t + \Delta t$ .	55
5.1.	Elemento de volumen representativo $EV R_{s_i}$ utilizado para modelar la transformación eutectoide inversa estable.	59
5.2.	Perfil de la concentración de carbono en el $EV R_{s_i}$ .	60
5.3.	Microestructura inicial con una matriz ferrítica-perlítica en la cual (a) no van a ocurrir contactos y (b) si van a ocurrir contactos entre los halos vecinos de austenita durante la transformación eutectoide inversa estable.	63
5.4.	Elemento de volumen representativo $EV R_{m_j}$ utilizado para modelar la transformación eutectoide inversa metaestable $EV R_{m_j}$ .	64
5.5.	Perfil de la concentración de carbono en el $EV R_{m_j}$ .	66
5.6.	Elemento de volumen representativo $EV R_{h_i}$ propuesto para el modelado de la homogeneización de la concentración de carbono en la austenita.	69
5.7.	Perfil de concentración de carbono en el $EV R_{h_i}$ durante el proceso de homogeneización de la concentración de carbono en la austenita.	70
5.8.	Elemento de volumen representativo $EV R_{A_i}$ propuesto para modelar la transformación ausferrítica.	72
5.9.	Contacto entre halos vecinos de ausferrita durante la transformación ausferrítica.	75
5.10.	Variación de (a) $N_{\alpha ps_i}/N_{\alpha ps_i}^{ext}$ respecto de $\xi_i$ y (b) $N_{\alpha ps_i}$ y $N_{\alpha ps_i}^{ext}$ respecto del tiempo de austemperizado. $t_A^*$ es el tiempo para el cual la transformación ausferrítica finaliza.	77
5.11.	Nucleación de subunidades en la superficie del nódulo de grafito: (a) nucleación de la primera familia de subunidades ( <i>fams1</i> ) y (b) nucleación de todas las posibles familias de subunidades que pueden formarse en la superficie del nódulo de grafito. En ambas figuras, se representa en línea de trazos la superficie que contiene a las familias de subunidades nucleadas en la superficie del nódulo.	80
5.12.	Nucleación de subunidades de ferrita en las puntas de las subunidades existentes de acuerdo al concepto de volumen extendido. Interior de la ausferrita (a) antes de una nueva nucleación y (b) después de una nueva nucleación.	81
5.13.	Idealización de la microestructura para modelar la transformación martensítica.	82
6.1.	Respuestas del modelo analizadas en el estudio de sensibilidad 1.	93
6.2.	Diagrama de dispersión del tiempo requerido para que la fracción volumétrica de austenita alcance su máximo valor. Influencia de (a) el conteo de nódulos de grafito y (b) la temperatura de austenizado.	96

6.3.	Diagrama de dispersión del tiempo requerido para que la fracción en volumen de la austenita alcance su máximo valor en función del conteo de nódulos de grafito y de la temperatura de austenizado. . . . .	96
6.4.	Diagrama de dispersión de la duración de la transformación ausferrítica. Influencia de (a) la temperatura de austemperizado y (b) el conteo de nódulos de grafito. . . . .	97
6.5.	Diagrama de dispersión de la duración de la transformación ausferrítica en función de la temperatura de austemperizado y del conteo de nódulos de grafito. . . . .	98
6.6.	Diagrama de dispersión de la fracción en volumen de subunidades de ferrita al final del tratamiento térmico. Influencia de (a) la temperatura de austenizado y (b) la temperatura de austemperizado. . . . .	98
6.7.	Diagrama de dispersión de la fracción en volumen de austenita al final del tratamiento térmico. Influencia de (a) la temperatura de austenizado y (b) la temperatura de austemperizado. . . . .	99
6.8.	Diagrama de dispersión de la variación de la longitud de la probeta, al final del tratamiento térmico, respecto de su longitud inicial. Influencia de (a) el tipo de matriz inicial y (b) la temperatura de austenizado. . .	100
6.9.	Respuestas del modelo analizadas en el estudio de sensibilidad 2. . . . .	102
6.10.	Diagrama de dispersión de la fracción en volumen de subunidades de ferrita al final de tratamiento térmico. Influencia de (a) el tiempo de austemperizado y (b) el conteo de nódulos de grafito. . . . .	105
6.11.	Diagrama de dispersión de la fracción en volumen de subunidades de ferrita al final de tratamiento térmico. Influencia de (a) la temperatura de austenizado y (b) la temperatura de austemperizado. . . . .	106
6.12.	Diagrama de dispersión de la fracción en volumen de austenita al final de tratamiento térmico. Influencia de (a) el tiempo de austemperizado, (b) la temperatura de austenizado y (c) la temperatura de austemperizado. . . . .	108
6.13.	Diagrama de dispersión de la fracción en volumen de austenita al final de tratamiento térmico. Influencia de (a) los nódulos de grafito y (b) la concentración inicial de níquel. . . . .	108
6.14.	Diagrama de dispersión de la fracción en volumen de martensita, al final del tratamiento térmico, en función del tiempo de austemperizado. . . . .	109
6.15.	Diagrama de dispersión de la fracción en volumen martensita al final de tratamiento térmico. Influencia de (a) el tiempo y la temperatura de austemperizado y (b) el tiempo de austemperizado y el conteo de nódulos de grafito. . . . .	110
6.16.	Diagrama de dispersión de la variación de la longitud de la probeta, al final del tratamiento térmico, respecto de su longitud inicial. Influencia de (a) el tipo de matriz inicial y (b) el tiempo de austemperizado. . . . .	111

## Índice de figuras

6.17. Diagrama de dispersión de la variación de la longitud de la probeta, al final del tratamiento térmico, respecto de su longitud inicial. Influencia de (a) la temperatura de austenizado y (b) la temperatura de austemperizado. . . . .	112
6.18. Diagrama de dispersión de la variación de la longitud de la probeta, al final del tratamiento térmico, respecto de su longitud inicial. Influencia de (a) el tiempo y la temperatura de austemperizado y (b) el tiempo de austemperizado y el conteo de nódulos de grafito. . . . .	112
7.1. Discretización de la geometría modelada para simular los ensayos con austemperizado completo. . . . .	117
7.2. Variaciones normalizadas de la longitud de la probeta calculadas con el modelo y obtenidas experimentalmente. . . . .	119
7.3. Evolución de la temperatura, en el punto 1 de la probeta, y de la variación longitudinal de la probeta respecto de su longitud inicial, durante todo el tratamiento térmico de austemperizado (ensayo NC3). . . . .	120
7.4. Evolución de las fracciones volumétricas de fase y de la temperatura, en el punto 1 de la probeta, durante todo el tratamiento térmico de austemperizado (ensayo NC3). . . . .	121
7.5. Tiempo mínimo requerido para que las probetas se austenicen por completo. . . . .	121
7.6. Tiempo de austemperizado requerido para que la transformación ausferrítica finalice. Influencia de (a) el conteo de nódulos de grafito y (b) la temperatura de austemperizado. . . . .	122
7.7. Discretización de la geometría modelada para simular los ensayos con distintos tiempos de austemperizado. . . . .	124
7.8. Evolución de la temperatura y del desplazamiento longitudinal, en el punto 1 de la probeta, correspondiente al ensayo E1 (tiempo de austemperizado 60min). . . . .	125
7.9. Fracciones volumétricas de fase al final del tratamiento de austemperizado, en función del tiempo de austemperizado, para los ensayos: (a) E1, (b) E2 y (c) E3. . . . .	126
7.10. Muñón de dirección: (a) geometría modelada y (b) malla de elementos finitos. . . . .	127
7.11. Evolución de la temperatura en los puntos 1 y 2 del muñón de dirección. . . . .	128
7.12. Fracción volumétrica de subunidades de ferrita, al final del tratamiento térmico, para un tiempo de austemperizado de 60min. . . . .	129
7.13. Fracciones volumétricas de fase en el punto 1 del muñón de dirección, al final del tratamiento térmico, en función del tiempo de austemperizado. . . . .	130
7.14. Distribución de las deformaciones al final del tratamiento térmico para un tiempo de austemperizado de: (a) 8min, (b) 60min y (c) 120min. . . . .	130

7.15. Distribución de las tensiones residuales, en $MPa$ , al final del tratamiento térmico para un tiempo de austemperizado de: (a) $8min$ , (b) $60min$ y (c) $120min$ . . . . .	131
B.1. Diagrama de flujo del algoritmo propuesto para calcular los parámetros del modelo de la transformación ausferrítica $k_1$ y $k_2$ . . . . .	158



# Índice de tablas

2.1. Propiedades mecánicas de la función de hierro nodular para distintos tipos de matrices, según las normas ASTM A536 y A897. . . . .	8
2.2. Propiedades mecánicas de la función de hierro nodular austemperizada según la norma ASTM A897M-06. . . . .	12
6.1. Factores considerados en el estudio de sensibilidad 1. La composición química se encuentra en <i>%peso</i> , el conteo de nódulos de grafito en <i>nod/m<sup>3</sup></i> , el espaciado interlaminar de la perlita en <i>m</i> y las temperaturas de austenizado y austemperizado en <i>°C</i> . . . . .	94
6.2. Índices de sensibilidad de primer orden para cada una de las respuestas analizadas en el estudio de sensibilidad 1. . . . .	94
6.3. Índices de sensibilidad de efecto total para cada una de las respuestas analizadas en el estudio de sensibilidad 1. . . . .	95
6.4. Factor de mayor influencia para cada una de las respuestas analizadas en el estudio de sensibilidad 1. . . . .	101
6.5. Factores considerados para el estudio de sensibilidad 2. La composición química se encuentra en <i>%peso</i> , el conteo de nódulos de grafito en <i>nod/m<sup>3</sup></i> , el espaciado interlaminar de la perlita en <i>m</i> , las temperaturas de austenizado y austemperizado en <i>°C</i> y el tiempo de austemperizado en <i>s</i> . . . . .	103
6.6. Índices de sensibilidad de primer orden para cada una de las respuestas analizadas en el estudio de sensibilidad 2. . . . .	104
6.7. Índices de sensibilidad de efecto total para cada una de las respuestas analizadas en el estudio de sensibilidad 2. . . . .	104
6.8. Valores de los factores más influyentes que determinan los límites 1 y 2 en la figura 6.12a. . . . .	107
6.9. Valores de los factores más influyentes que determinan los límites 1 y 2 en la figura 6.14. . . . .	109
6.10. Valores de los factores más influyentes que determinan los límites 1 y 2 en la figura 6.16b. . . . .	111
6.11. Factor de mayor influencia para cada una de las respuestas analizadas en el estudio de sensibilidad 2. . . . .	113

## Índice de tablas

7.1. Microestructuras iniciales de las probetas utilizadas en los ensayos de austemperizado completo. . . . .	116
7.2. Configuraciones de los ensayos con austemperizado completo. . . . .	117
7.3. Composición química de la fundición de hierro nodular, en <i>%peso</i> , de los ensayos con distintos tiempos de austemperizado. . . . .	123
7.4. Microestructuras iniciales de las probetas utilizadas en los ensayos con distintos tiempos de austemperizado. . . . .	123
7.5. Configuraciones de los ensayos con distintos tiempos de austemperizado.	123
A.1. Propiedades térmicas de la fundición de hierro nodular [Kapturkiewicz et al., 2005, Celentano et al., 2013, Lacaze and Gerval, 1998]. . . . .	155
A.2. Propiedades mecánicas de la fundición de hierro nodular [Celentano et al., 2013]. . . . .	156

# Lista de símbolos

## Modelo termomecánico

$A^p$	Índice de endurecimiento.
$a_v$	Deformación volumétrica secante debida a la variación del volumen por los cambios de temperatura y de fase.
$\mathbf{b}_f$	Vector de fuerzas específicas de cuerpo.
$\mathbf{C}$	Tensor constitutivo isótropo.
$c$	Capacidad calorífica específica tangente.
$C_y$	Función de endurecimiento total.
$C_{y_0}$	Tensión de fluencia.
$C_h$	Función de endurecimiento plástico isotrópico.
$\mathbf{e}$	Tensor de deformación de Almansi.
$\mathbf{e}^p$	Tensor de deformación plástica de Almansi.
$\mathbf{e}^v$	Tensor de deformación de Almansi asociado a los cambios de temperatura y de fases.
$\mathbf{F}$	Tensor gradiente de deformación.
$F$	Función de fluencia.
$\boldsymbol{\sigma}$	Tensor de tensiones de Cauchy.
$\sigma_{eq}$	Tensión equivalente o de von Mises.
$h$	Coefficiente de transferencia de calor por convección-radiación.
$J$	Determinante del tensor gradiente de deformación.
$J_2$	Segundo invariante de la parte desviatoria del tensor de tensiones de Cauchy.
$\mathbf{k}$	Tensor isótropo de conductividad térmica.
$k$	Coefficiente de conductividad térmica.
$L_{\alpha \rightarrow \gamma}$	Calor latente generado por la transformación eutectoide inversa estable.
$L_{\gamma \rightarrow \alpha p}$	Calor latente generado por la transformación ausferrítica.
$L_{p \rightarrow \gamma}$	Calor latente generado por la transformación eutectoide inversa metaestable.
$L_v$	Derivada de Lie.
$\dot{\lambda}$	Parámetro de consistencia plástica.
$n^p$	Exponente de endurecimiento por deformación.

## Lista de símbolos

$\Omega$	Configuración espacial del cuerpo (dominio abierto y acotado).
$Q$	Calor latente generado por el cambio de fase.
$q_{conv}$	Flujo de calor normal a la intercara.
$\Gamma_q$	Contorno de $\Omega$ en donde está prescrito el vector flujo de calor.
$\rho$	Densidad.
$\rho_o^{mic}$	Densidad macroscópica de la microestructura al comienzo del tratamiento térmico.
$\rho^{mic}$	Densidad macroscópica de la microestructura para un tiempo $t$ .
$T$	Temperatura.
$T_{env}$	Temperatura del medio que rodea a $\Omega$ .
$t$	Tiempo.
$\mathcal{T}$	Intervalo de tiempo de análisis.
$\mathbf{1}$	Tensor unitario.
$\nabla$	Operador de gradiente.

## Estrategia de solución numérica

$\mathbf{C}$	Matriz de capacidad.
$\mathbf{C}_{pc}$	Matriz de cambio de fase.
$\Delta \mathbf{U}$	Vector de incremento de desplazamientos nodales.
$\Delta \mathbf{T}$	Vector de incremento de temperatura nodales.
$\Delta t$	Incremento de tiempo.
$e_{RU}$	Medida del residuo desbalanceado admisible para el problema mecánico.
$e_{RT}$	Medida del residuo desbalanceado admisible para el problema térmico.
$\mathbf{F}_U$	Vector de fuerzas exteriores.
$\mathbf{J}_{ii}$	Subelementos de la matriz Jacobiana.
$\mathbf{K}$	Matriz de conductividad.
$\mathbf{K}_U$	Matriz de rigidez.
$\mathbf{P}$	Matriz de acoplamiento debido a los efectos térmicos en las leyes constitutivas.
$\mathbf{R}_T$	Vector de residuos del problema térmico.
$\mathbf{R}_U$	Vector de residuos del problema mecánico.
$\mathbf{T}$	Vector de temperatura nodales.
${}^t\mathbf{T}$	Valores convergidos del vector de temperatura nodales para el tiempo $t$ .
$\mathbf{U}$	Vector de desplazamientos nodales.
${}^t\mathbf{U}$	Valores convergidos del vector de desplazamientos nodales para el tiempo $t$ .
$\ \cdot\ _2$	Norma vectorial del espacio $L_2$ .

## Modelo metalúrgico

$A_i$	Número de subunidades de ferrita de la primera familia de subunidades en formarse.
$B$	Número de nuevas subunidades que pueden formarse por cada subunidad existente.
$c_2$	Parámetro del modelo de la transformación martensítica.
$c_{\alpha/\gamma}$	Concentración de carbono de equilibrio de la ferrita en la intercara ferrita-austenita.
$c_{\alpha/\theta}$	Concentración de carbono de equilibrio de la ferrita en la intercara ferrita-cementita.
$c_{\alpha s_i}$	Concentración de carbono de la ferrita en $r_{\alpha_i}$ .
$c_{\alpha m_j}$	Concentración de carbono de la ferrita en $z_{\alpha_j}$ .
$c_{\alpha p}$	Concentración de carbono de las subunidades de ferrita.
$c_{Gr}$	Concentración de carbono del grafito.
$c_{\gamma/\alpha}$	Concentración de carbono de equilibrio de la austenita en la intercara austenita-ferrita.
$c_{\gamma/Gr}$	Concentración de carbono de equilibrio de la austenita en la intercara austenita-grafito.
$c_{\gamma/\theta}$	Concentración de carbono de equilibrio de la austenita en la intercara austenita-cementita.
$c_{\gamma h}$	Concentración de carbono de la austenita en $r_{cel_i}$ .
$c_{\gamma b_i, h_i, l_i}$	Concentración de carbono de los bloques, el halo y las láminas de austenita (transformación ausferrítica).
$c_{\gamma_i}$	Concentración de carbono de la austenita al comienzo de la transformación ausferrítica.
$c_{\gamma T o'}$	Concentración de carbono de la austenita al final de la transformación ausferrítica.
$c_{\gamma n z_i}$	Concentración de carbono en la austenita en la cual se va a producir la nucleación de las nuevas subunidades.
$c_p$	Concentración de carbono de la perlita.
$c_\theta$	Concentración de carbono de la cementita.
$c_T$	Concentración de carbono nominal de la fundición de hierro nodular.
$D_\gamma$	Coefficiente de difusión de carbono en la austenita.
$D_\alpha$	Coefficiente de difusión de carbono en la ferrita.
$\Delta G_{m_i}$	Máxima energía libre disponible para la nucleación en condiciones de paraequilibrio.
$\Delta G_{m_i}^o$	Máxima energía libre disponible para la nucleación, en condiciones de paraequilibrio, cuando la transformación ausferrítica comienza.

## Lista de símbolos

$\xi_i$	Coeficiente que reduce el número de subunidades formadas teniendo en cuenta la disminución del número de sitios disponibles para la nucleación dentro de la ausferrita a medida que ésta contiene mayor cantidad de subunidades.
$f_{ab_i}$	Función que permite tener en cuenta la influencia de la concentración de carbono de la austenita en $\Delta G_{m_i}$ .
$f_{Ausf}$	Fracción en volumen de ausferrita.
$f_{Ausf_i}$	Fracción en volumen de la ausferrita respecto del volumen del $EVR_{A_i}$ .
$f_{\alpha p}$	Fracción en volumen de subunidades de ferrita.
$f_{\alpha p_{gr_i}}$	Máxima fracción en volumen de subunidades de ferrita que se puede formar sobre la superficie del nódulo de grafito.
$f_{\alpha p_i}^{fams1}$	Fracción volumétrica de la primera familia de subunidades de ferrita respecto del volumen de la ausferrita.
$f_{\alpha p_i}$	Fracción en volumen de subunidades de ferrita respecto del volumen del $EVR_{A_i}$ .
$f_{\alpha p_{max_i}^{ausf}}$	Fracción en volumen de subunidades de ferrita cuando la transformación ausferrítica se detiene.
$f_{\alpha_S}$	Fracción en volumen de ferrita.
$f_{con_A}$	Suma de las fracciones en volumen de grafito y ausferrita cuando los halos vecinos de ausferrita comienzan a estar en contacto (transformación ausferrítica).
$f_{con_{EI}}$	Suma de las fracciones en volumen de grafito y austenita estable cuando los halos vecinos de austenita estable comienzan a estar en contacto (transformación eutectoide inversa estable).
$f_{Gr}$	Fracción en volumen de grafito.
$f_{\gamma}$	Fracción total en volumen de austenita.
$f_{\gamma_{s,m}}$	Fracción en volumen de austenita formada en las transformaciones eutectoide estable y eutectoide metaestable.
$f_{\gamma_{b,h,l}}$	Fracción en volumen de austenita de bloques, de halos y de láminas.
$f_{(\gamma_b \rightarrow m)}$	Fracción volumétrica de los bloques de austenita que se transforman en martensita, relativas al volumen inicial de los bloques austenita.
$f_{(\gamma_h \rightarrow m)}$	Fracción volumétrica del halo de austenita que se transforman en martensita, relativas al volumen inicial del halo de austenita.
$f_{\gamma_b^o, \gamma_h^o}$	Fracción en volumen de austenita de bloques y de halos al comienzo de la transformación martensítica.
$f_m$	Fracción en volumen de martensita total.
$f_{m_{b,h}}$	Fracción en volumen de martensita de bloques y de halos.
$f_{set_i}$	Fracción inicial de nódulos de grafito perteneciente a la familia $i$ , normalizada respecto de la fracción inicial de nódulos de grafito $f_{Gr_o}$ .
$f_{\theta/p}$	Fracción en volumen de cementita relativa al volumen de perlita.
$f_{\theta}$	Fracción en volumen de cementita.

$f_p$	Fracción en volumen de perlita.
$G_i$	Energía de activación para la nucleación.
$G_n$	Mínima energía necesaria para obtener una cantidad detectable de ferrita.
$I_{\alpha p_i}$	Número de familias de subunidades por unidad de tiempo, formadas en el interior de la ausferrita.
$ips_j$	Espaciado interlaminar de la colonia de perlita.
$k_{1,2,3}$	Parámetros del modelo de la transformación ausferrítica.
$l_{\alpha p}$	Longitud de una subunidad.
$N_{set_i}$	Número de nódulos de grafito por unidad de volumen.
$N_{\alpha p s_i}$	Número de subunidades que componen a una familia de subunidades formada en el interior de la ausferrita.
$N_{\alpha p s_i}^{ext}$	Número de subunidades que componen a una familia de subunidades, las cuales nuclearon y crecieron dentro de un volumen extendido que representa el interior de la ausferrita.
$N_{\alpha p s_{gr_i}}^{ext}$	Número de subunidades que componen a una familia de subunidades, las cuales nuclearon en la superficie del nódulo de grafito.
$N_{\alpha p s_{tip_i}}^{ext}$	Número de subunidades que componen a una familia de subunidades, las cuales nuclearon en las puntas de las subunidades existentes.
$n_{famg}$	Número de familias de grafito.
$n_{famc}$	Número de familias de colonias de perlita.
$n_{\alpha p_i}$	Número de subunidades existentes en las cuales la nueva familia de subunidades nucleará.
$\vartheta_i$	Máxima fracción en volumen de subunidades de ferrita que puede formarse al final de la transformación ausferrítica.
$r_{A_i}$	Radio exterior de la envoltura esférica de ausferrita.
$r_{\alpha_i}$	Radio del $EVR_{s_i}$ .
$r_{cel_i}$	Radio del $EVR_{h_i}$ .
$r_{Gr_i}$	Radio de los nódulos de grafito.
$r_{\gamma_i}$	Radio del halo de austenita estable.
$\rho_{\alpha}$	Densidad de la ferrita.
$\rho_{\alpha p}$	Densidad de las subunidades de ferrita.
$\rho_{Gr}$	Densidad del grafito.
$\rho_{\gamma}$	Densidad de la austenita.
$\rho_{\gamma_{b,h,l}}$	Densidad de la austenita de bloques, de halos y de láminas.
$\rho_{\gamma_{T'}}$	Densidad de la austenita al final de la transformación ausferrítica.
$\rho_m$	Densidad de la martensita.
$\rho_{m_{b,h}}$	Densidad de la martensita de bloques y de halos.
$\rho_p$	Densidad de la perlita.
$\rho_T$	Densidad total de la fundición de hierro nodular.
$T_{AS}$	Temperatura de comienzo de la transformación ausferrítica.

*Lista de símbolos*

$T_{EI_S}$	Temperatura de comienzo de la transformación eutectoide inversa estable.
$T_{EI_{MS}}$	Temperatura de comienzo de la transformación eutectoide inversa metaestable.
$t_{gro_i}$	Tiempo de crecimiento de una familia de subunidades.
$t_{inc_i}$	Tiempo de incubación de una familia de subunidades.
$T_{MS}$	Temperatura de comienzo de la transformación martensítica.
$u_{\alpha p}$	Volumen de una subunidad de ferrita.
$vol_{Ausf_i^{fams1}}$	Volumen de ausferrita que contiene a la primera familia de subunidades.
$vol_{\alpha p_i^{fams1}}$	Volumen de subunidades de ferrita de la primera familia.
$vol_{EVR_{A_i}}$	Volumen del $EVR_{A_i}$ .
$vol_{EVR_{h_i}}$	Volumen del $EVR_{h_i}$ .
$x_{\gamma f/\alpha p}$	Relación entre las fracciones en volumen de láminas de austenita y de subunidades de ferrita, de un fajo.
$\varphi_i$	Coefficiente que tiene en cuenta la disminución de la superficie del nódulo de grafito disponible para la nucleación de subunidades de ferrita.
$z_{\alpha_j}$	Largo del $EVR_{m_j}$ .
$z_{\gamma_j}$	Coordenada de la intercara austenita-ferrita.
$z_{\theta_j}$	Coordenada de la intercara cementita-austenita.

# Abreviaturas

<i>ADI</i>	Fundición de hierro nodular austemperizada ( <i>Austempered Ductile Iron</i> ).
<i>CCT</i>	Transformación a enfriamiento continuo ( <i>Continuous Cooling Transformation</i> ).
<i>EVR</i>	Elemento de volumen representativo.
<i>HA</i>	Homogeneización de la concentración de carbono en la austenita.
<i>TA</i>	Transformación ausferrítica.
<i>TEI<sub>s</sub></i>	Transformación eutectoide inversa estable.
<i>TEI<sub>m</sub></i>	Transformación eutectoide inversa metaestable.
<i>TM</i>	Transformación martensítica.
<i>TMM</i>	Termomecánico-metalúrgico.
<i>TTA</i>	Tratamiento térmico de austemperizado.
<i>TTT</i>	Transformación a temperatura constante ( <i>Time Temperature Transformation</i> ).



# Capítulo 1

## Introducción

### 1.1. Contexto y motivación

En la industria en general, y especialmente en la autopartista y la agropartista, se utiliza la fundición de hierro nodular para la fabricación de piezas que forman parte de los sistemas de generación de potencia, transmisión, suspensión y freno y, también, para la fabricación de miembros estructurales de maquinaria pesada, siendo muchos de estos componentes de alta responsabilidad.

Debido a que las piezas de fundición son obtenidas por colada y moldeo, es posible lograr dimensiones muy próximas a las requeridas, lo que permite disminuir el trabajo de mecanizado posterior y, de esta manera, reducir los costos de producción. Esta ventaja, sumada a las buenas propiedades mecánicas que se han alcanzado en las últimas décadas, le ha permitido a la fundición nodular reemplazar a otros materiales más tradicionalmente utilizados.

Las propiedades mecánicas de la fundición nodular pueden cubrir un amplio rango de valores, posibilitando su empleo en numerosos tipos de aplicaciones. Los valores específicos para una determinada aplicación se obtienen frecuentemente mediante tratamientos térmicos. Entre ellos, los más comúnmente empleados son el recocido, el normalizado, el templado y el austemperizado. El tratamiento térmico de austemperizado fue el último en ser desarrollado y con él se obtiene la denominada fundición de hierro nodular austemperizada o ADI por su nombre en inglés (*Austempered Ductile Iron*).

La fundición de hierro nodular austemperizada tiene una creciente aplicación en la industria automotriz gracias al relativo bajo costo de producción de las piezas y a la buena combinación de propiedades mecánicas que presenta. Este material ofrece una excelente alternativa al acero colado y al forjado; y también al aluminio cuando se requiere elevada resistencia y buenos valores de ductilidad y resistencia al desgaste. La fundición nodular austemperizada tiene, además, una conveniente relación peso-tensión de fluencia en comparación con la de otros materiales utilizados en las mismas aplicaciones. Algunos componentes producidos con fundición nodular

## Capítulo 1. Introducción

austemperizada tienen un costo 20 % menor, por unidad de peso, que los fabricados en acero y un 50 % menor que los realizados en aluminio.

En los últimos años, se han llevado a cabo numerosas investigaciones con el fin de establecer cómo se relacionan las propiedades de la fundición nodular austemperizada con su microestructura y también para determinar de qué manera esta última depende de los principales parámetros que caracterizan al tratamiento térmico. Otro aspecto que ha sido estudiado es el cambio de volumen y la deformación que experimenta la pieza durante el tratamiento térmico de austemperizado. La mayoría de estos estudios ha sido de carácter experimental y en ellos se analizan pequeñas probetas de geometría sencilla, cuyos resultados no son completamente extrapolables a las piezas comúnmente producidas en la industria.

Se han identificado numerosos y variados aspectos que influyen sobre la microestructura y las dimensiones finales de la pieza de hierro nodular cuando ésta es austemperizada. Algunos de dichos aspectos, entre los que se pueden mencionar el tamaño y la geometría, la composición química y la microestructura inicial, están relacionados con la pieza misma; mientras que otros, tales como las temperaturas y los tiempos de tratamiento, tienen que ver con los parámetros que caracterizan al tratamiento térmico. Por otro lado, los tiempos de tratamiento mínimos requeridos, para obtener una fundición nodular austemperizada con una matriz final completamente ausferrítica, dependen de las mismas variables.

Con lo hasta aquí comentando, es posible apreciar que el problema presenta un elevado grado de complejidad. Determinar los valores apropiados de estos parámetros es de suma importancia, ya que de esto depende la obtención de las propiedades mecánicas requeridas.

A fines de la década del 90 se comenzaron a desarrollar los primeros modelos relacionados con los cambios de fase que ocurren en un tratamiento de austemperizado de una fundición de hierro nodular, siendo algunos de ellos adaptaciones de modelos analíticos propuestos para otros materiales. A lo largo de los años se han planteado nuevos modelos, tanto analíticos como numéricos, pero en muy pocos de ellos se consideran, y de manera simultánea, aspectos importantes tales como: la geometría de la pieza, que puede ocasionar diferente evolución de la temperatura en los distintos puntos; características importantes de la microestructura inicial, como por ejemplo la distribución de tamaño de nódulos; y la totalidad del ciclo térmico, lo que permite que la microestructura final de cada etapa que lo compone constituya la microestructura inicial de la etapa que le sigue. La mayoría de los modelos hallados en la bibliografía son aplicables a casos sencillos, no consideran todos los parámetros que intervienen en el proceso y simulan sólo alguna de sus etapas.

Debido a las limitaciones de los modelos desarrollados hasta el momento y a la complejidad del proceso del tratamiento térmico de austemperizado, los métodos de diseño actuales aún recurren, en buena parte, a la práctica de prueba y error, sobre todo para piezas complejas. Esto encarece sobremanera el desarrollo de nuevas piezas de fundición de hierro nodular austemperizadas repercutiendo negativamente en los

costes de las industrias.

Todo lo antes comentado motiva el trabajo de esta tesis, que busca desarrollar un nuevo modelo para la simulación del tratamiento térmico de austemperizado de la fundición de hierro nodular que tenga en cuenta los principales aspectos que intervienen y que permita realizar simulaciones más realistas contemplando la totalidad del proceso, para, de esta manera, mejorar el diseño del tratamiento y de las piezas.

## 1.2. Importancia del problema

El mercado en el cual están inmersas las industrias autopartistas y agropartistas es cada vez más competitivo, exigiendo a las mismas la mejora continua de la calidad de sus productos y procesos y la reducción de sus costos totales. Las herramientas utilizadas para el desarrollo de piezas y de los procesos de obtención de las mismas deben ser confiables y útiles para permitirle a la empresa ser lo más competitiva posible a la hora de afrontar los cambios y las innovaciones que requiere el mercado.

Debido a la complejidad de los fenómenos que intervienen en el tratamiento térmico de austemperizado, determinar los valores apropiados de todas las variables que intervienen es una tarea dificultosa. Como se mencionó anteriormente, tanto el diseño de las piezas de fundición de hierro nodular que serán sometidas a un austemperizado como el diseño del tratamiento mismo requiere, aún hoy, de numerosas pruebas experimentales, a través de las cuales se ajustan variables tales como: composición química del material, microestructura inicial, tiempos y temperaturas de tratamientos, y dimensiones y geometría de la pieza. La desventajas de realizar pruebas experimentales, es que sus costos y tiempo de ejecución son elevados. Poder realizar un estudio numérico que permita determinar los valores de las variables más importantes reducirá el tiempo y el costo de desarrollo, y en muchas ocasiones se podrá obtener soluciones próximas a las óptimas; meta que, especialmente en piezas complejas, es difícil de alcanzar con el método tradicional de diseño.

Los cambios de dimensiones que ocurren como consecuencia del tratamiento térmico obligan a la realización de un mecanizado postratamiento que aumenta el tiempo y los costos de producción. En ocasiones, la pieza se encuentra fuera de tolerancia por falta y no por exceso de material, motivo por el cual la misma es rechazada. Poder predecir los cambios de las dimensiones de la pieza, ocasionados por el tratamiento térmico, permitirá elegir las dimensiones de las piezas antes del tratamiento, para que luego del mismo tenga las dimensiones requeridas, reduciéndose o eliminándose el trabajo de mecanizado postratamiento.

## 1.3. Alcance del estudio

En esta tesis se aborda el tratamiento térmico de austemperizado de *tres pasos* de piezas de fundición de hierro nodular. Se tiene en cuenta la evolución de las fases y

de las deformaciones en todos los puntos de la pieza, durante todo el ciclo térmico del tratamiento (calentamiento y enfriamiento de la pieza). La pieza al inicio del tratamiento se encuentra en estado bruto de colada, es decir, su matriz es el resultado del proceso de solidificación.

El enfoque del presente estudio es esencialmente teórico-numérico, pero se utilizan resultados de ensayos experimentales, realizados por otros investigadores, para validar el modelo propuesto.

## 1.4. Objetivos del estudio

El objetivo general de esta tesis es modelar el tratamiento de austemperizado *de tres pasos* de la fundición de hierro nodular. Para ello interesa simular la totalidad del proceso en forma continua y predecir la evolución de la microestructura del material y de las tensiones y deformaciones de la pieza. Mediante el logro de este objetivo se espera explicar la evolución de las principales variables y parámetros que intervienen en el proceso.

Los objetivos específicos son los siguientes:

1. Explicar los cambios de fase que se producen durante el tratamiento de austemperizado y desarrollar modelos que sean capaces de representarlos y puedan relacionarse entre sí para simular la evolución de la microestructura durante todo el tratamiento térmico.
2. Desarrollar e implementar en un programa de elementos finitos académico un nuevo modelo metalúrgico y las interacciones entre los problemas térmico, mecánico y metalúrgico propias del tratamiento térmico modelado.
3. Validar el modelo propuesto comparando su respuesta con resultados de ensayos experimentales.
4. Realizar un estudio de sensibilidad del modelo completo para evaluar su funcionamiento y para comprender el efecto de cada parámetro del tratamiento, y de la interacción entre ellos, sobre la evolución de las variables del proceso y sobre el resultado final.
5. Implementar en un programa de elementos finitos comercial de propósito general el modelo metalúrgico propuesto y las interacciones entre los problemas térmico, mecánico y metalúrgico.

## 1.5. Metodología

La representación del tratamiento térmico en estudio se realiza a través de un modelo multiescala que tiene en cuenta la característica multifísica del problema. A

escala macroscópica, la escala de la pieza, se aborda el aspecto termomecánico del proceso, y las ecuaciones correspondientes son resueltas por el método de los elementos finitos en el dominio espacial y por el método de las diferencias finitas en lo que respecta al dominio temporal. La formulación termomecánica utilizada es la que se encuentra implementada en los programas de elementos finitos académico y comercial (Abaqus).

El aspecto metalúrgico del problema se trata a la escala microscópica, la escala de los microconstituyentes, en la que la microestructura es representada a través de elementos de volumen representativo. Se consideran leyes de tipo determinístico para la nucleación, crecimiento e interacción de las fases presentes.

La evolución de las variables macroscópicas como la temperatura y los desplazamientos depende de la evolución de las variables microscópicas, tales como las fracciones de fase y las concentraciones de carbono, y viceversa. Esto determina que los problemas térmico, mecánico y metalúrgico deban resolverse de manera acoplada. El acoplamiento entre problemas planteados en distintas escalas (térmico-metalúrgico y mecánico-metalúrgico) se realiza mediante ecuaciones que vinculan dichas escalas.

## 1.6. Contenidos de la tesis

En el Capítulo 2 se presenta una descripción general de la fundición de hierro nodular y una explicación más detallada de la microestructura y de las propiedades mecánicas de la fundición de hierro nodular austemperizada. Seguidamente se describen los métodos industriales actualmente utilizados para llevar a cabo el tratamiento térmico de austemperizado, indicando sus principales ventajas y desventajas. Por último se explican los cambios de fase que intervienen en el tratamiento térmico de austemperizado *de tres pasos* y las teorías que los explican.

En el Capítulo 3 se realiza la revisión bibliográfica de los modelos desarrollados para simular el tratamiento térmico de austemperizado *de tres pasos*, mencionándose las principales hipótesis simplificadoras en ellos realizadas. Al final del Capítulo se describen cuáles son las necesidades que motivan el desarrollo de un nuevo modelo.

En el Capítulo 4 se presentan las características generales del modelo termomecánico-metalúrgico propuesto en esta tesis, describiéndose por separado el modelo termomecánico (formulación termomecánica y modelo constitutivo del material) y el modelo metalúrgico. Además se explican las interacciones entre los problemas térmico, mecánico y metalúrgico consideradas para modelar el tratamiento térmico de austemperizado *de tres pasos*. Finalmente se presenta el esquema utilizado para resolver numéricamente los problemas térmico, mecánico y metalúrgico, teniendo en cuenta el tipo de acoplamiento entre los problemas (unidireccional y bidireccional).

En el Capítulo 5 se presentan los modelos de cambio de fase propuestos en esta tesis para la representación del aspecto metalúrgico del problema, describiéndose para cada caso los elementos de volumen representativo correspondientes y las hipótesis simplificadoras aplicadas a las fases presentes en la microestructura de la fundición nodular (forma, composición química, tamaño y distribución dentro de la

## Capítulo 1. Introducción

microestructura).

En el Capítulo 6 se realiza un estudio de sensibilidad del modelo termomecánico-metalúrgico cuando éste es utilizado para simular dos tratamientos térmicos de austemperizado *de tres pasos*. Para cuantificar la influencia de las variables de entrada del modelo (factores) en las distintas respuestas analizadas se utiliza un método basado en la varianza. Además, para estudiar de qué manera afectan los factores más influyentes se utilizan diagramas de dispersión.

En el Capítulo 7 se simulan dos tratamientos térmicos, realizados en laboratorio, de probetas de pequeñas dimensiones que permiten validar el modelo propuesto. Por otro lado se presenta el estudio computacional del tratamiento térmico de una pieza de aplicación automotriz.

En el Capítulo 8 se exponen las conclusiones finales de la tesis y las contribuciones originales, proponiéndose, además, las líneas futuras de trabajo.

Finalmente, en el Apéndice A se encuentran las propiedades de la fundición de hierro nodular utilizadas en las simulaciones, en el Apéndice B se explica el método utilizado para ajustar los parámetros empíricos del modelo de cambio de fase de la transformación ausferrítica y en el Apéndice C se encuentra la implementación el modelo metalúrgico en el programa de elementos finitos comercial Abaqus.

# Capítulo 2

## Fundición de hierro nodular austemperizada

### 2.1. Fundición de hierro nodular

La fundición de hierro nodular es una aleación cuyos principales elementos son el hierro, el carbono y el silicio. Su microestructura está formada por nódulos de grafito embebidos en una matriz metálica. El tipo de matriz depende del proceso de enfriamiento y de la composición química de la fundición. Mediante procesos de enfriamiento convencionales, en los que la pieza se deja enfriar en el molde, se obtienen matrices ferríticas, ferríticas-perlíticas o perlíticas. Mediante procesos especiales en los cuales se controla la evolución de la temperatura durante el enfriamiento se pueden obtener matrices ausferríticas o martensíticas.

De acuerdo a la clasificación presentada por Rollason para fundiciones ferrosas [Rollason, 1973], la fundición de hierro nodular pertenece al grupo de las fundiciones grises. En la figura 2.1 se presenta dicha clasificación, a la cual se le ha agregado la fundición de matriz ausferrítica.

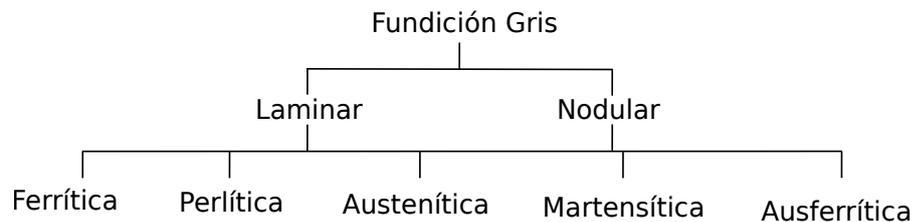


Figura 2.1: Clasificación de la fundición gris de acuerdo a la morfología del grafito y tipo de matriz metálica.

Para obtener una fundición gris de buena calidad, es decir sin formación de carburos, es necesario contar con una velocidad de enfriamiento baja o moderada durante la solidificación, y una concentración de carbono equivalente  $CE > 4,3\%peso$ . Una concentración de carbono de  $4,3\%peso$  corresponde a la composición eutéctica del

## Capítulo 2. Fundición de hierro nodular austemperizada

diagrama  $Fe-C$  estable. La concentración  $CE$ , además de considerar la concentración de carbono nominal de la aleación, tiene en cuenta la influencia de otros elementos de aleación. Una de las clásicas ecuaciones para determinar  $CE$ , en  $\%peso$ , considerando el efecto del silicio y del fósforo, es la siguiente [Yescas, 2001]:

$$CE = C + \frac{Si + P}{3} \quad (2.1)$$

donde  $C$ ,  $Si$  y  $P$  son las concentraciones nominales de la fundición en  $\%peso$ .

Para obtener una fundición gris nodular es necesario realizar un tratamiento de nodulización previo al colado de las piezas, en el cual se le agrega cerio o magnesio como agente nodulizante.

Los valores de las propiedades mecánicas de la fundición de hierro nodular varían en un amplio rango, porque dependen de su tipo de matriz metálica. En la tabla 2.1 se observan las propiedades mecánicas para distintos tipos de matrices según las normas ASTM A536 y A897.

Tipo de matriz	Resistencia a la tracción [MPa]	Tensión de fluencia [MPa]	Elongación a la rotura [%]	Dureza [HBW]
Ferrítica	414	276	18	149-187
Ferrítica-perlítica	448-552	310-379	6-12	170-255
Perlítica	689	483	3	217-267
Martensítica	827	621	2	240-300
Ausferrítica	750-1600	500-1300	1-11	241-512

Tabla 2.1: Propiedades mecánicas de la fundición de hierro nodular para distintos tipos de matrices, según las normas ASTM A536 y A897.

La microestructura necesaria para lograr las propiedades mecánicas requeridas para una determinada aplicación del material, puede obtenerse mediante la selección adecuada de la composición química y/o tratamientos térmicos. La clasificación y el propósito de los principales tratamientos térmicos se describen a continuación [Tohru, 1998]:

- Liberación de tensiones: se utiliza para liberar tensiones originadas durante el proceso de solidificación. En este tratamiento térmico no se produce un cambio apreciable en la microestructura.
- Recocido: se utiliza para reducir la cantidad de perlita en la matriz. Como consecuencia, los cambios en las propiedades mecánicas son: incremento de la ductilidad y la tenacidad, y disminución de la dureza. La matriz obtenida después del tratamiento térmico es ferrítica.
- Normalizado: tiene como objetivo mejorar la resistencia del material, sin reducir demasiado la ductilidad. La matriz obtenida es perlítica.

## 2.1. Fundición de hierro nodular

- Templado: su finalidad es incrementar la resistencia y la dureza del material. La matriz obtenida es martensítica.
- Austemperizado: se realiza para obtener un material con buenos niveles de resistencia, dureza y ductilidad. La matriz obtenida es ausferrítica.
- Endurecimiento superficial: tiene como objetivo mejorar la resistencia superficial incrementando la dureza del material.

Los tratamientos térmicos de recocido, normalizado, templado y austemperizado requieren de una matriz austenítica a elevada temperatura. El proceso de enfriamiento desde la temperatura de austenizado ( $T_\gamma$ ) hasta la temperatura ambiente ( $T_{amb}$ ) es propio de cada uno de ellos, como se observa en la figura 2.2. El recocido requiere una velocidad de enfriamiento baja para que de este modo la austenita pueda transformarse completamente en ferrita. El normalizado requiere una velocidad de enfriamiento moderada para que la austenita pueda transformarse completamente en perlita. El templado requiere una velocidad de enfriamiento elevada para que sea posible evitar la transformación eutectoide y, así, transformar la austenita en martensita. El austemperizado requiere de una velocidad de enfriamiento igual a la del templado hasta la temperatura de austemperizado ( $T_A$ ), seguido de una etapa isotérmica a dicha temperatura, luego de la cual el material se enfría hasta la temperatura ambiente con una velocidad moderada.

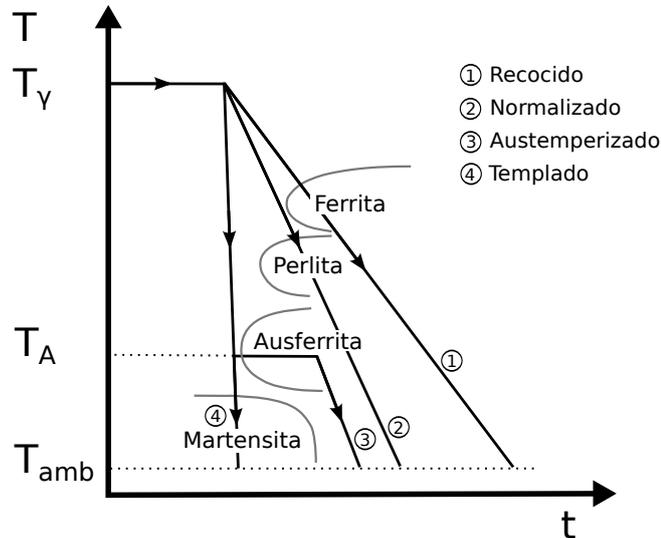


Figura 2.2: Proceso de enfriamiento de los tratamientos térmicos de recocido, normalizado, templado y austemperizado.

## 2.2. Fundición de hierro nodular austemperizada

La microestructura característica de la fundición de hierro nodular austemperizada está formada por nódulos de grafito embebidos en una matriz ausferrítica. La ausferrita es un compuesto microestructural formado por pequeñas subunidades de ferrita (con forma de láminas, placas o discos [Kovacs, 1994]) y austenita con alto contenido de carbono.

Las subunidades se encuentran agrupadas en los denominados fajos. Un fajo está formado por una determinada cantidad de subunidades, separadas entre sí por finas láminas de austenita. Todas las subunidades que forman parte de un mismo fajo tienen la misma orientación cristalina [Yescas, 2001]. La austenita que forma dichas láminas tiene una elevada concentración de carbono. Los fajos están separados entre sí por los llamados bloques de austenita. Si la transformación ausferrítica se desarrolla por completo, los bloques de austenita son pequeños y con una concentración de carbono similar a la que tienen las láminas de austenita. En la figura 2.3 se observan las fases que componen a la microestructura de la fundición nodular austemperizada, con una matriz completamente ausferrítica.

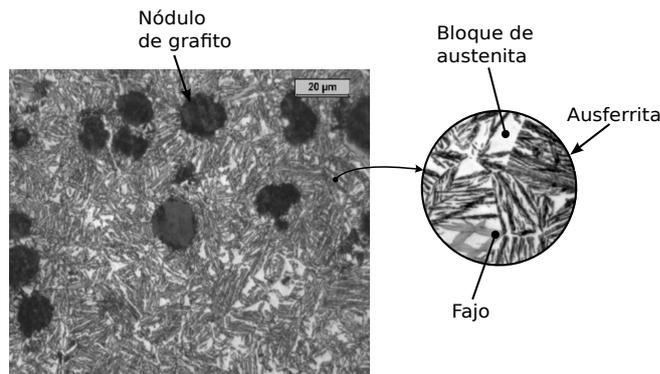


Figura 2.3: Fases de la microestructura de una fundición de hierro nodular austemperizada, con una matriz completamente ausferrítica.

El tamaño y la constitución de las subunidades dependen, principalmente, de la temperatura de austemperizado  $T_A$  (ver figura 2.2). Temperaturas de austemperizado elevadas (mayores a  $300^\circ C$ ) dan lugar a subunidades grandes, denominadas subunidades de ferrita superior. Las temperaturas de tratamiento bajas (menores a  $280^\circ C$ ) originan subunidades pequeñas, en las que aparecen finos carburos de hierro, y que son llamadas subunidades de ferrita inferior. Los finos carburos mencionados son del tipo metaestables, como por ejemplo el denominado  $\epsilon$  carburo, debido al elevado contenido de silicio que tiene la fundición nodular [Ahmadabadi, 1998]. Se ha observado que la formación de estos carburos es independiente del tiempo de austemperizado y de la composición química de la fundición. La temperatura de transición entre ambos tipos de subunidades generalmente se encuentra en el intervalo  $280 \leq T_A \leq 300^\circ C$

## 2.2. Fundición de hierro nodular austemperizada

[Yescas, 2001]. En la figura 2.4 se presenta un esquema de las subunidades de ferrita superior e inferior.

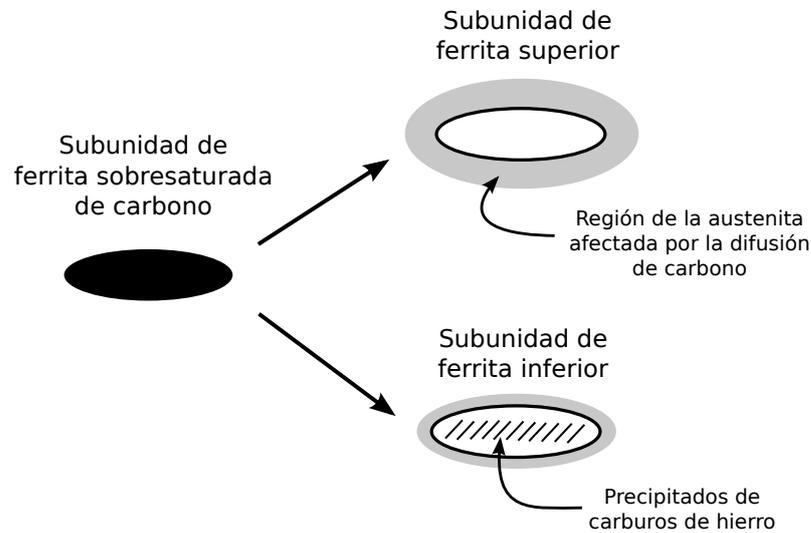


Figura 2.4: Subunidades de ferrita superior e inferior.

La fundición de hierro nodular austemperizada se caracteriza por tener buenos valores de ductilidad y resistencia al desgaste, como así también elevada tensión de fluencia y resistencia a la fatiga. Los valores de estas propiedades tienen un amplio rango de variación, siendo uno de los principales motivos por los cuales la ADI es empleada en un gran número de aplicaciones [Yoo et al., 1999, Yang and Putatunda, 2005].

Existe una estrecha relación entre la microestructura y las propiedades mecánicas de la fundición nodular austemperizada, motivo por el cual ambas dependen de las mismas variables. Experimentalmente se ha encontrado que la temperatura de austemperizado tiene una gran influencia en las propiedades mecánicas porque ésta define el tipo de subunidades que se formarán. Para temperaturas bajas de austemperizado (microestructura con subunidades de ferrita inferior) el material tiene elevados niveles de dureza y tensión de fluencia, haciendo que sea apto para piezas sometidas a elevadas tensiones de contacto. Por otro lado, a elevadas temperaturas de austemperizado (microestructura con subunidades de ferrita superior) el material tiene elevadas ductilidad y tenacidad con buenos valores de dureza (260-350HBW), haciendo que sea apto para miembros estructurales [Yescas, 2001].

Se ha observado que los defectos comunes de las piezas de fundición de hierro tales como rechupes, escorias atrapadas, segregaciones y ciertos productos eutécticos no deseados, pueden disminuir los beneficios que la matriz ausferrítica le confiere a las piezas de ADI [Yescas, 2001].

Las propiedades mecánicas de la fundición austemperizada de uso comercial, según la norma ASTM A897M-06, se detallan en la tabla 2.2.

## Capítulo 2. Fundición de hierro nodular austemperizada

Grado	Resistencia a la tracción [MPa]	Tensión de fluencia [MPa]	Elongación [%]	Energía de impacto [J]	Dureza [HBW]
750-500-11	750	500	11	110	241-302
900-650-09	900	650	9	100	269-341
1050-750-07	1050	750	7	80	302-375
1200-850-04	1200	850	4	60	341-444
1400-1100-02	1400	1100	2	35	388-477
1600-1300-01	1600	1300	1	20	402-512

Tabla 2.2: Propiedades mecánicas de la función de hierro nodular austemperizada según la norma ASTM A897M-06.

### 2.3. Tratamiento térmico de austemperizado

En la actualidad las piezas de fundición de hierro nodular austemperizada pueden obtenerse industrialmente utilizando los siguientes procesos:

- Tratamiento térmico de austemperizado *de tres pasos* [Thomson et al., 2000, Putman and Thomson, 2003, Fraś et al., 2012].
- Tratamiento térmico de austemperizado *in situ* [Yoo et al., 1999, Mendez et al., 2015].

El tratamiento térmico *de tres pasos*, de uso corriente, permite austemperizar piezas que generalmente ya han sido total o parcialmente mecanizadas, aprovechando así la baja dureza que tiene el material antes de dicho tratamiento. En piezas con pequeñas tolerancias en las dimensiones es necesario un mecanizado postratamiento para corregir cambios dimensionales ocurridos durante el austemperizado. El proceso está formado por tres pasos más un posterior enfriamiento desde la temperatura de austemperizado hasta la temperatura ambiente; el correspondiente ciclo térmico se presenta en la figura 2.5. El primer paso consiste en calentar la pieza, obtenida por el método clásico de colado y moldeo, desde la temperatura ambiente ( $T_{amb}$ ) hasta la de austenizado ( $T_\gamma$ ) con el objetivo de obtener una matriz completamente austenítica y con una concentración de carbono apropiada. El segundo paso consiste en enfriar rápidamente la pieza desde la temperatura de austenizado hasta la de austemperizado ( $T_A$ ). Por último, en el tercer paso se mantiene la pieza a la temperatura de austemperizado con el objetivo de obtener una matriz ausferrítica.

El tratamiento de austemperizado denominado *in situ*, de desarrollo más reciente, permite obtener piezas austemperizadas directamente desde el proceso de solidificación. En él se combinan parte del proceso de colado y moldeo, y parte del tratamiento térmico *de tres pasos* como se observa en la figura 2.6. Las piezas coladas, ya solidificadas, se desmoldan en caliente y se enfrían hasta la temperatura de austenizado requerida. Luego, el proceso continúa siguiendo los pasos dos y tres del tratamiento *de tres pasos*,

### 2.3. Tratamiento térmico de austemperizado

más el posterior enfriamiento hasta la temperatura ambiente. Las piezas obtenidas por medio del tratamiento *in situ*, en comparación con las obtenidas mediante el *de tres pasos*, tienen menor costo de producción porque es posible ahorrar el calentamiento desde la temperatura ambiente hasta la de austenizado. Como contrapartida, el mecanizado se realiza en condiciones más severas debido a que las piezas tienen una elevada dureza en todas la etapas del mecanizado.

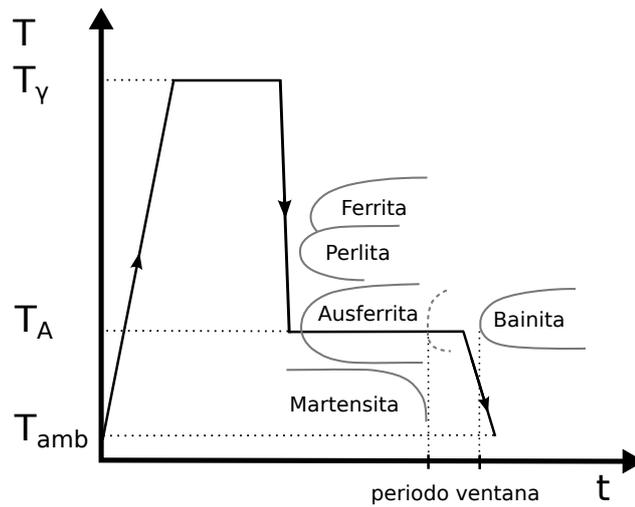


Figura 2.5: Ciclo térmico del tratamiento de austemperizado *de tres pasos*.

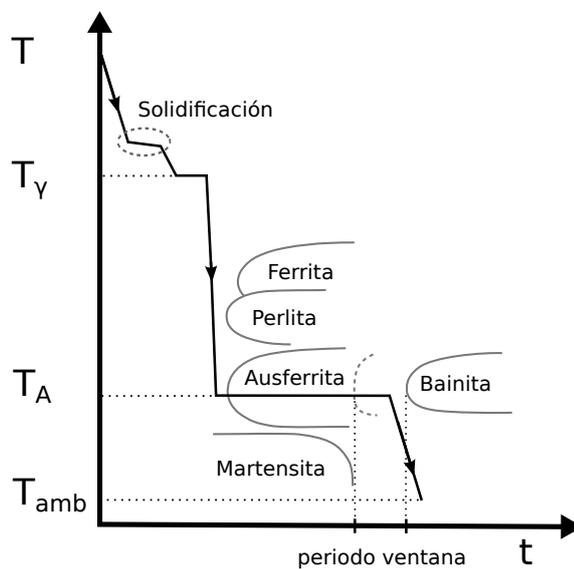


Figura 2.6: Ciclo térmico del tratamiento de austemperizado *in situ*.

Las temperaturas de austenizado y austemperizado generalmente utilizadas están comprendidas en los rangos de  $850^{\circ}\text{C} < T_{\gamma} < 950^{\circ}\text{C}$  y  $250^{\circ}\text{C} < T_A < 450^{\circ}\text{C}$ ,

## Capítulo 2. Fundición de hierro nodular austemperizada

respectivamente. Los tiempos de austenizado y austemperizado para obtener una matriz completamente ausferrítica varían con el tipo de microestructura inicial, las temperaturas de austenizado y austemperizado, la composición química y el tamaño y la geometría de la pieza [Thomson et al., 2000, Yescas et al., 2001].

Experimentalmente se ha observado que, durante el tratamiento isotérmico llevado a cabo a la temperatura de austemperizado, se desarrollan las siguientes etapas [Achary and Venugopalan, 2000, Yescas et al., 2001, Putman and Thomson, 2003, Amran et al., 2010]:

- Etapa I: en esta etapa parte de la matriz austenítica se transforma en subunidades de ferrita por medio de la transformación ausferrítica. Al final de esta etapa, la fracción de ferrita y la concentración de carbono de la austenita son máximas.
- Etapa II: esta etapa comienza con la precipitación de carburos de hierro en la austenita. De esta forma, la fracción de austenita y su concentración de carbono disminuyen. La matriz obtenida en esta etapa es similar a la de los aceros bainíticos.

Entre las etapas I y II se encuentra el denominado periodo ventana, ver figuras 2.5 y 2.6, durante el cual las fracciones de las fases y sus concentraciones de carbono se mantienen prácticamente constantes. Su duración depende de la composición química de la fundición, de los patrones de microsegregación de los elementos de aleación y de las temperaturas de austenizado y austemperizado [Thomson et al., 2000, Yescas, 2001].

Si el tiempo de austemperizado está comprendido dentro de la etapa I, parte de la austenita se transformará en martensita durante el enfriamiento hasta la temperatura ambiente [Yescas and Bhadeshia, 2002], ver figura 2.7; mientras que si el tiempo está comprendido dentro de la etapa II existirán precipitados de carburos de hierro dentro de la austenita obteniéndose una matriz similar a la de los aceros bainíticos de baja concentración de silicio [Yang and Putatunda, 2005]. Experimentalmente se ha observado que el tiempo óptimo de austemperizado de la fundición nodular se encuentra dentro de su periodo ventana, porque permite obtener una matriz completamente ausferrítica, es decir sin formación de martensita ni de carburos de hierro.

En una pieza de gran espesor no siempre es posible obtener una matriz ausferrítica en todas sus regiones. Su núcleo suele tener una matriz ferrítica-perlítica y/o perlítica, mientras que en la región próxima a la superficie exterior es ausferrítica. Se ha desarrollado un concepto denominado austemperabilidad de la fundición nodular, el cual caracteriza cualitativamente la posibilidad de evitar la transformación de austenita en ferrita y/o perlita cuando el material es enfriado desde la temperatura de austenizado a una determinada velocidad de enfriamiento. Si durante el enfriamiento es posible evitar la formación de ferrita y perlita en todo el volumen de una pieza significa que el material tiene buena austemperabilidad; de lo contrario significa que su austemperabilidad no es la apropiada, pudiendo mejorarse ésta mediante el agregado de determinados elementos de aleación [Sohi et al., 2010].

## 2.4. Transformaciones de fase durante el TTA de tres pasos

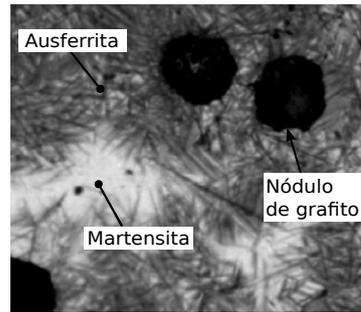


Figura 2.7: Microestructura de una fundición de hierro nodular con una matriz ausferrítica-martensítica.

Como consecuencia del tratamiento térmico de austemperizado se producen cambios en las dimensiones de las piezas. Estos cambios se deben a las distintas densidades que tienen las fases que componen a la microestructura del material antes y después del tratamiento térmico, y a las tensiones internas generadas durante el desarrollo del mismo.

Se ha encontrado relación entre los cambios de dimensiones y los parámetros del tratamiento térmico tales como el tipo de matriz inicial, el tiempo de austemperizado, las temperaturas de austenizado y austemperizado, el conteo de nódulos de grafito y el tamaño de la pieza [Moncada and Sikora, 1996, Sosa et al., 2004]. Cuando el tiempo de austemperizado es el adecuado para obtener una matriz completamente ausferrítica, el parámetro que más influye en el cambio de dimensión es el tipo de matriz inicial. Cuando la matriz inicial es perlítica, la expansión de la pieza es mayor que la que se produce cuando la matriz inicial es ferrítica [Sosa et al., 2009]. La variación en las dimensiones tiene un rol importante cuando las tolerancias de las piezas son muy estrechas, como ocurre en el caso de los sistemas de transmisión de potencia. En algunas ocasiones las dimensiones quedan fuera de tolerancia por falta y no por exceso de material, hecho que conlleva directamente al descarte de las piezas.

## 2.4. Transformaciones de fase durante el tratamiento térmico de austemperizado *de tres pasos*

Cuando una pieza de fundición de hierro nodular es sometida al tratamiento térmico de austemperizado *de tres pasos* se producen transformaciones de fase tanto durante el calentamiento como durante el enfriamiento de la misma.

Durante el calentamiento desde la temperatura ambiente hasta la temperatura de austenizado se da lugar a la transformación eutectoide inversa, mediante la cual la matriz inicial de tipo ferrítica, perlítica o ferrítica-perlítica se transforma en una completamente austenítica.

Durante el enfriamiento desde la temperatura de austenizado hasta la temperatura

## Capítulo 2. Fundición de hierro nodular austemperizada

ambiente, y según sea el desarrollo del mismo en relación con algunas características del material, pueden ocurrir diferentes transformaciones de fase mediante las cuales la austenita puede transformarse en ferrita, en perlita, en ausferrita y/o en martensita. Estas transformaciones pueden ser clasificadas en difusionales y displacivas [Bhadeshia, 1982, Bhadeshia, 1987]. Las transformaciones difusionales son las eutectoide estable y metaestable, por medio de las cuales la austenita se transforma en ferrita y perlita, respectivamente. Las transformaciones displacivas son la ausferrítica y la martensítica, por medio de las cuales la austenita se transforma en ausferrita y martensita, respectivamente.

Para una determinada composición química de la fundición, las transformaciones difusionales que ocurren durante el enfriamiento dependen de la velocidad de enfriamiento y del conteo de nódulos de grafito por unidad de volumen [Venugopalan, 1990b]. Para velocidades de enfriamiento bajas, la austenita se transforma generalmente en ferrita y grafito. A velocidades de enfriamiento elevadas, una parte o la totalidad de la austenita se transforma en martensita. Para velocidades intermedias, es posible que la austenita se transforme en perlita. En la figura 2.8a se indican en el diagrama CCT (por su nombre en inglés *continuous cooling transformation*) las transformaciones que pueden ocurrir cuando una fundición de hierro nodular es enfriada, a velocidad constante, hasta la temperatura ambiente.

Cuando la fundición se enfría rápidamente hasta la temperatura de austemperizado, y se mantiene a dicha temperatura el tiempo adecuado, la austenita se transforma en ausferrita. Para obtener una matriz completamente ausferrítica en todo el volumen de la pieza, esta temperatura debe ser alcanzada de manera tal que se pueda evitar la transformación eutectoide, es decir, que el material tenga una buena austemperabilidad. La mínima velocidad de enfriamiento necesaria para evitar dicha transformación, es denominada velocidad crítica de enfriamiento [Venugopalan, 1990a]. En la figura 2.8b se encuentran representadas en el diagrama TTT (por su nombre en inglés *time temperature transformation*) las transformaciones que ocurren cuando la fundición es enfriada y mantenida a una temperatura dada. En la misma figura también es posible identificar la velocidad crítica de enfriamiento.

A continuación se describen con mayor detalle las transformaciones mencionadas.

## 2.4. Transformaciones de fase durante el TTA de tres pasos

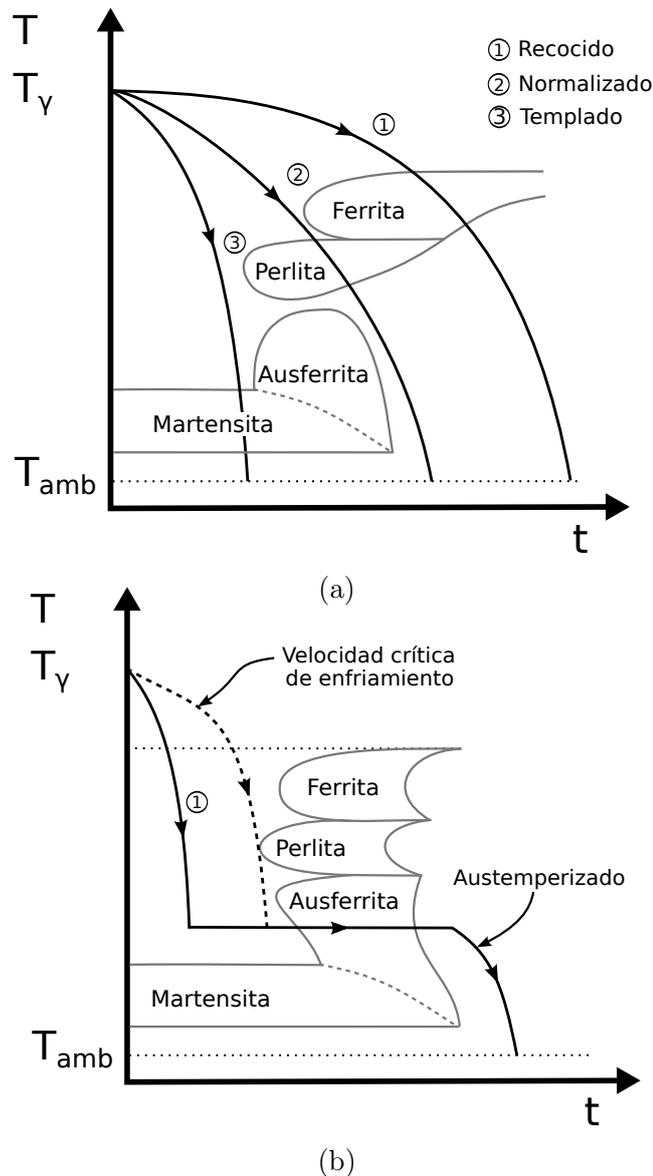


Figura 2.8: Diagrama de las transformaciones de fase (a) CCT y (b) TTT.

### 2.4.1. Transformación eutectoide inversa

Cuando se realiza el tratamiento térmico de austemperizado a piezas de fundición nodular en bruto de colada, una etapa importante es la denominada austenizado. En dicha etapa se desarrolla la transformación eutectoide inversa que da como resultado una matriz completamente austenítica a la temperatura de austenizado.

La fundición de hierro nodular, considerada como punto de partida del tratamiento térmico de austemperizado *de tres pasos*, puede tener una matriz ferrítica, ferrítica-perlítica o perlítica. En la figura 2.9 se observa una fundición de hierro nodular con una matriz ferrítica-perlítica. La ferrita se ubica en forma de halos alrededor de los

## Capítulo 2. Fundición de hierro nodular austemperizada

nódulos de grafito produciendo así la clásica microestructura de ojo de buey. Luego de la transformación eutectoide inversa, la matriz se encuentra formada completamente por austenita recristalizada [Sikora and Boeri, 1999].

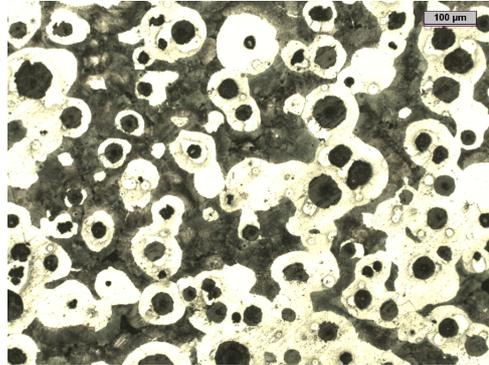


Figura 2.9: Fundición de hierro nodular con matriz ferrítica-perlítica.

La transformación eutectoide inversa puede ser estable en la cual la ferrita y parte de los nódulos de grafito se transforman en austenita, y metaestable en la cual la perlita se transforma en austenita.

En la transformación eutectoide estable la nucleación de la austenita ocurre generalmente en la superficie de los nódulos de grafito [Batra et al., 2005]. En algunas fundiciones no aleadas la microsegregación negativa del silicio hace que la nucleación ocurra preferencialmente en las últimas zonas en solidificar [Ghergu et al., 2012].

Cuando la nucleación ocurre en la superficie de los nódulos de grafito la temperatura de comienzo de la transformación es  $T_{\alpha}^0$ , mientras que si ocurre en las últimas zonas en solidificar la temperatura es  $T_{\alpha}$ , siendo  $T_{\alpha}^0$  la mayor temperatura del campo trifásico del sistema estable  $Fe-C-Si$  y  $T_{\alpha}$  la menor temperatura del campo trifásico del sistema estable  $Fe-C-Si$ , ver figura 2.10.

En la transformación metaestable la nucleación de la austenita comienza generalmente en la intercara ferrita-cementita [Kapturkiewicz et al., 2005]. La transformación se inicia a la temperatura  $T_p$  si  $T_p > T_{\alpha}$ , o, a la temperatura  $T_{\alpha}$  si  $T_{\alpha} > T_p$ , siendo  $T_p$  la menor temperatura del campo trifásico del sistema metaestable  $Fe-C-Si$  y  $T_{\alpha}$  la menor temperatura del campo trifásico del sistema estable  $Fe-C-Si$  [Ghergu et al., 2012], ver figura 2.10.

El crecimiento de la austenita, tanto para la transformación estable como para la metaestable, ocurre por la difusión de carbono de largo alcance [Verhoeven et al., 1990]. En la transformación estable, cuando la nucleación se da en la superficie de los nódulos de grafito, el carbono difunde desde el grafito hacia la ferrita a través de la austenita que se está formando. Cuando la nucleación ocurre en las últimas zonas en solidificar el carbono difunde por los bordes de granos [Ghergu et al., 2012]. En la transformación metaestable, el carbono difunde desde las láminas de cementita hacia las de ferrita a través de la austenita en formación. En este caso los nódulos de grafito no actúan

## 2.4. Transformaciones de fase durante el TTA de tres pasos

como fuente de carbono, ya que las dimensiones de las láminas de la perlita son mucho menores que el espaciado que hay entre los nódulos [Kapturkiewicz et al., 2005].

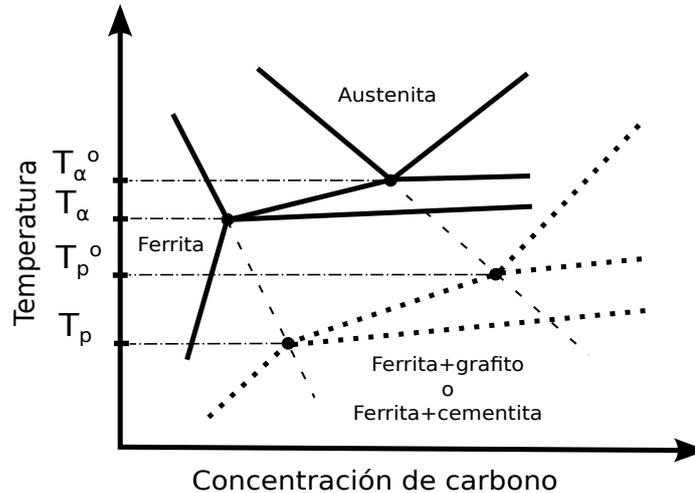


Figura 2.10: Isopleta del diagrama de fases *Fe-C-Si* estable (líneas sólidas) y metaestable (líneas de puntos) [Ghergu et al., 2012].

Los elementos de aleación modifican las temperaturas de comienzo del cambio de fase, como así también las concentraciones de equilibrio de carbono. Por otro lado las cantidades de algunos elementos de aleación, como por ejemplo la concentración de níquel, pueden cambiar la zona de nucleación de la austenita [Ghergu et al., 2012].

Para el tratamiento térmico de austemperizado el tiempo de austenizado tiene que ser el suficiente para que la transformación eutectoide inversa se desarrolle por completo. Si el tiempo es demasiado corto la transformación puede ser incompleta, lo que modificaría las propiedades mecánicas del material obtenidas al final del tratamiento de austemperizado [Kapturkiewicz et al., 2005]. El tiempo necesario para que la transformación se desarrolle por completo depende del tipo de matriz inicial. Si la matriz inicial es perlítica el tiempo de austenizado es menor que el requerido para una matriz inicial ferrítica. Experimentalmente se ha observado la influencia del tamaño de los nódulos de grafito, en especial cuando la matriz inicial es ferrítica. A medida que los nódulos de grafito son más pequeños se incrementa la velocidad de la transformación eutectoide inversa estable, reduciendo el tiempo de austenizado [Fraś et al., 2012].

### 2.4.2. Transformación eutectoide

La transformación eutectoide puede producirse total o parcialmente cuando el material se enfría, luego del austenizado, a una velocidad de enfriamiento menor a la velocidad crítica. La transformación eutectoide puede ser dividida en estable y metaestable [Lacaze and Gerval, 1998, Carazo et al., 2012].

## Capítulo 2. Fundición de hierro nodular austemperizada

Durante la transformación eutectoide estable la austenita se transforma en ferrita y grafito [Venugopalan, 1990a, Venugopalan, 1990b, Carazo, 2012]. La nucleación y el crecimiento comienzan cuando la temperatura es menor a  $T_\alpha$ , ver figura 2.10. Los sitios de nucleación generalmente se encuentran en la superficie de los nódulos de grafito, que actúan como sumideros de carbono. En trabajos experimentales se ha reportado también como sitios de nucleación los bordes de grano de la austenita cuando la ferrita se obtiene mediante un tratamiento isotérmico realizado a elevada temperatura [Brown and Hawkes, 1951]. Es importante destacar que bajo condiciones de enfriamiento normales no se produce la nucleación de nuevas partículas de grafito, las cuales actuarían también como sumidero de carbono [Venugopalan, 1990b].

La cinética de crecimiento de la ferrita está gobernada por la difusión de carbono de largo alcance desde la austenita hacia los nódulos de grafito a través del halo de ferrita en crecimiento. El coeficiente de difusión de carbono en la ferrita depende de la temperatura y de los elementos de aleación. A mayor temperatura, mayor es el coeficiente de difusión. Algunos elementos de aleación como el estaño, el antimonio y el cobre reducen la difusión del carbono, disminuyendo de este modo la velocidad de la transformación [Johnson and Kovacs, 1978].

La fuerza motriz que impulsa a la transformación eutectoide estable depende del sobreenfriamiento térmico definido como  $T_\alpha - T$ , favoreciendo un mayor valor del mismo a la formación de la ferrita. Los elementos de aleación modifican la temperatura  $T_\alpha$ . Algunos elementos de aleación, tales como el silicio y el molibdeno, favorecen la formación de ferrita al aumentar la temperatura  $T_\alpha$ , motivo por el cual son denominados estabilizantes de la ferrita [Venugopalan, 1990a, Ghergu et al., 2012]. El molibdeno tiene el efecto descrito siempre y cuando su concentración no supere el 0,3%*peso* [Venugopalan, 1990a]. Algunos elementos como el manganeso, el cromo, el níquel y el cobre disminuyen  $T_\alpha$ , motivo por el cual son denominados estabilizantes de la austenita [Ghergu et al., 2012].

Durante la transformación eutectoide metaestable la austenita se transforma en perlita. La nucleación y el crecimiento de la perlita comienzan cuando la temperatura es menor a  $T_p$ , ver figura 2.10. La nucleación se da en los bordes de grano de la austenita y en la intercara austenita-ferrita [Venugopalan, 1990a]. El crecimiento está gobernado por la difusión de carbono de largo alcance.

Por debajo de la temperatura  $T_p$  las transformaciones eutectoide estable y metaestable son competitivas entre sí. Una vez comenzada la transformación metaestable, las fracciones de la ferrita y de los nódulos de grafito aumentan muy poco, ya que la transformación eutectoide metaestable tiene una velocidad mucho mayor que la transformación eutectoide estable [Venugopalan, 1990a].

Estas transformaciones no se modelarán en la presente tesis, dando por supuesto que la velocidad de enfriamiento desde la temperatura de austenización hasta la de austemperizado siempre supera la velocidad crítica en todos los puntos de la pieza.

### 2.4.3. Transformación ausferrítica

#### Cinética de la transformación ausferrítica

Cuando una fundición de hierro nodular con una matriz total o parcialmente austenítica es sometida a un tratamiento isotérmico a la temperatura de austemperizado, parte de la austenita se transforma en subunidades de ferrita [Yescas, 2001, Garín and Mannheim, 2003]. Esta transformación requiere de un proceso continuo de formación de subunidades. En la formación de cada subunidad se pueden identificar las siguientes tres etapas [Bhadeshia, 1981, Yescas, 2001]:

- Nucleación de la subunidad.
- Crecimiento de la subunidad de ferrita sobresaturada en carbono.
- Difusión del carbono desde la subunidad hacia la austenita.

Las subunidades son capaces de nuclear en dos regiones de la austenita. La primera región está compuesta por la austenita que se encuentra alrededor de los nódulos de grafito [Fraś and Górný, 2010, Fraś et al., 2012, Górný et al., 2014] y la segunda está compuesta por la austenita que se encuentra próxima a las puntas de las subunidades existentes. La nucleación que ocurre en la segunda región se denomina nucleación autocatalítica [Rees and Bhadeshia, 1992a, Matsuda and Bhadeshia, 2004, Santofimia et al., 2006, Gaude-Fugarolas and Jacques, 2006]. Las láminas de austenita de los fajos, que se encuentran próximas a las puntas de las subunidades, no forman parte de ninguna de las dos regiones de nucleación, debido a que su elevada concentración de carbono impide la nucleación y/o crecimiento de nuevas subunidades.

La nucleación comienza en la superficie de los nódulos de grafito. A medida que se van formando las subunidades de ferrita, se suma la nucleación autocatalítica, siendo ésta la que le permite al fajo adquirir su forma característica.

Desde el punto de vista termodinámico la nucleación de una subunidad de ferrita se produce cuando [Rees and Bhadeshia, 1992a, Matsuda and Bhadeshia, 2004]:

$$\Delta G_m < G_n \quad (2.2)$$

donde  $\Delta G_m$  es la máxima energía libre disponible para la nucleación y  $G_n$  es la mínima energía necesaria para obtener una cantidad detectable de ferrita.

La máxima energía libre disponible para la nucleación depende de la temperatura y de la composición química de la austenita. La mínima energía necesaria para obtener una cantidad detectable de ferrita depende solamente de la temperatura, y puede ser evaluada, en  $J/mol$ , utilizando la siguiente ecuación [Rees and Bhadeshia, 1992a, Matsuda and Bhadeshia, 2004, Gaude-Fugarolas and Jacques, 2006]:

$$G_n = 3,637T - 2540 \quad (2.3)$$

siendo la temperatura en °C.

## Capítulo 2. Fundición de hierro nodular austemperizada

En la figura 2.11 se representa la variación de  $\Delta G_m$  y  $G_n$  en función de la temperatura para una determinada composición química de la austenita. Cuando la temperatura sea  $T < T_{pc}$  se cumple el criterio termodinámico para la nucleación.

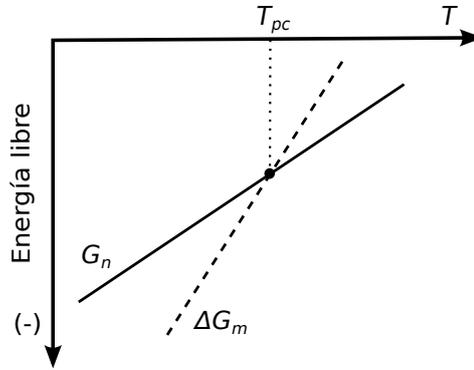


Figura 2.11: Máxima energía libre disponible para la nucleación  $\Delta G_m$  y mínima energía necesaria para obtener una cantidad detectable de ferrita  $G_n$ , en función de la temperatura.

La formación de un núcleo estable de ferrita no es instantánea, sino que requiere un tiempo de incubación. Se ha observado que el tiempo de incubación aumenta con (a) el aumento de la concentración de carbono en la austenita y (b) la disminución de la temperatura de austemperizado [Rees and Bhadeshia, 1992a, Matsuda and Bhadeshia, 2004].

Si bien algunos investigadores han propuesto una explicación del crecimiento de las subunidades de ferrita basada en una difusión de largo alcance del carbono, la teoría más ampliamente aceptada para el crecimiento de las subunidades de ferrita es la displaciva [Rees and Bhadeshia, 1992a, Thomson et al., 2000, Bhadeshia, 2001]. Esta teoría propone que durante el crecimiento de la subunidad, la austenita y la ferrita involucradas tienen la misma composición química, es decir, no hay difusión de largo alcance de carbono u otro tipo de elemento de aleación entre dichas fases.

El crecimiento de una subunidad se produce por el avance de la intercara ferrita-austenita. Este avance ocurre si existe una fuerza capaz de generar una tensión mayor a una tensión de fricción  $\tau$ , siendo esta última la que se opone al movimiento de la intercara. La encargada de proveer esa fuerza es la diferencia de la energía libre entre ambas fases [Bhadeshia and Edmonds, 1980].

El tamaño de la subunidad es limitado porque su crecimiento no es un proceso perfectamente termoelástico, motivo por el cual, a medida que la intercara avanza las fases se plastifican haciendo que la tensión de fricción  $\tau$  incremente. Este incremento, sumado a las posibles interacciones que pueden existir entre la intercara y los defectos de la matriz, hace que la diferencia de la energía libre entre ambas fases no sea lo suficientemente grande como para seguir moviendo la intercara, impidiendo de este modo que el crecimiento de la subunidad continúe [Bhadeshia and Edmonds, 1980].

Al existir un bajo coeficiente de difusión de carbono en la austenita, puede formarse cerca de la intercara ferrita-austenita la llamada atmósfera de *Cottrell*. Esta atmósfera

## 2.4. Transformaciones de fase durante el TTA de tres pasos

tiene un papel importante en el crecimiento de las subunidades ya que puede (a) anclar la intercara y (b) reducir la diferencia de energía libre entre las fases al tener una concentración de carbono elevada [Bhadeshia and Edmonds, 1980].

Desde el punto de vista termodinámico el crecimiento de una subunidad se produce cuando [Rees and Bhadeshia, 1992a, Matsuda and Bhadeshia, 2004]:

$$\Delta G^{\gamma \rightarrow \alpha} < G_{sd} \quad (2.4)$$

donde  $\Delta G^{\gamma \rightarrow \alpha}$  es el cambio de energía libre debido a la transformación de austenita a ferrita cuando ambas fases tienen la misma composición química y  $G_{sd}$  es la energía almacenada debido al cambio de forma que ocurre durante el crecimiento de la subunidad.

El cambio de energía libre debido a la transformación de austenita a ferrita depende de la temperatura y de la composición química de la austenita. La energía almacenada debido al cambio de forma que ocurre durante el crecimiento de la subunidad es constante e igual a  $G_{sd} = -400 \text{ J/mol}$  para la transformación ausferrítica. En la figura 2.12 se observa que, al aumentar el contenido de carbono en la austenita, disminuye el módulo del cambio de la energía libre  $\Delta G^{\gamma \rightarrow \alpha}$ .

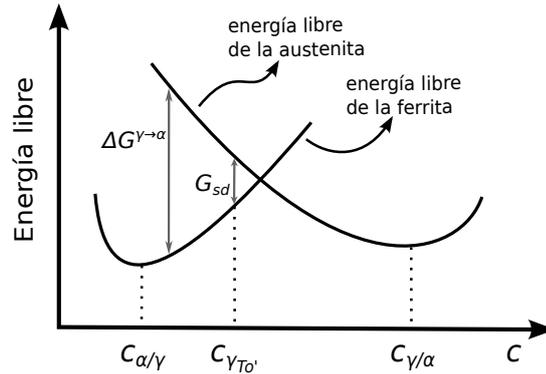


Figura 2.12: Energía libre de la austenita y de la ferrita en función de la concentración de carbono.

El tiempo necesario para que una subunidad crezca es muy pequeño. Hay indicios de que el crecimiento se desarrolla a elevada velocidad, a tal punto que puede ser considerado instantáneo [Matsuda and Bhadeshia, 2004].

Al finalizar el crecimiento de la subunidad, la ferrita se encuentra sobresaturada en carbono. La concentración se reduce por la posterior difusión de carbono desde la subunidad hacia la austenita, ocasionando en la austenita un enriquecimiento en carbono. Para el caso de subunidades de ferrita inferior, la concentración de carbono también se reduce por la precipitación de carburos de hierro en el interior de las subunidades. La difusión del carbono no genera crecimiento de la subunidad, hecho que ha sido confirmado experimentalmente en varios trabajos [Bhadeshia and Edmonds, 1980, Rees and Bhadeshia, 1992a, Chang, 1998, Yescas and Bhadeshia, 2002].

## Capítulo 2. Fundición de hierro nodular austemperizada

No se han reportado cambios apreciables en la fracción volumétrica de los nódulos de grafito durante la transformación ausferrítica. Este hecho indicaría que los nódulos no actuarían como fuente ni como sumidero de carbono durante la difusión de carbono desde la subunidad hacia la austenita [Kapturkiewicz et al., 2003].

Al comienzo del proceso de difusión se produce un apilamiento de carbono próximo a la intercara ferrita-austenita, retardando la nucleación de las nuevas subunidades. Este apilamiento es mayor a medida que aumenta la concentración de carbono en la austenita [Rees and Bhadeshia, 1992a, Chang, 1998].

Es importante remarcar que una subunidad puede formarse siempre y cuando los criterios termodinámicos para la nucleación y el crecimiento sean satisfechos (ecuaciones 2.2 y 2.4). La temperatura a partir de la cual comienzan a satisfacerse ambos criterios termodinámicos se denomina temperatura de comienzo de la transformación ausferrítica  $T_{AS}$ , ver figura 2.13. Una vez iniciada la transformación y cuando la concentración de carbono en la austenita alcanza el valor de  $c_{\gamma_{T_{o'}$ , uno o ambos criterios termodinámicos no serán satisfechos, motivo por el cual la transformación finaliza. La concentración  $c_{\gamma_{T_{o'}}$  aumenta a medida que la temperatura de austemperizado disminuye, esto permite que la transformación se prolongue y así obtener una mayor fracción de subunidades de ferrita. Experimentalmente se ha comprobado que el proceso de crecimiento se detiene cuando la concentración de carbono en la austenita es muy próxima a  $c_{\gamma_{T_{o'}}$ , lo cual indicaría que el mecanismo de crecimiento displacivo sería el apropiado para explicar el desarrollo de la transformación ausferrítica [Bhadeshia and Edmonds, 1980, Rees and Bhadeshia, 1992a, Yescas and Bhadeshia, 2002].

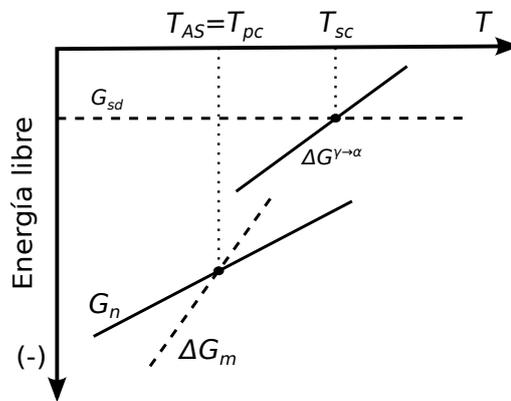


Figura 2.13: Temperatura de comienzo de la transformación ausferrítica.

### Influencia de los elementos de aleación

Para obtener una pieza con una matriz ausferrítica de buena calidad en todo su volumen se debe: a) evitar la formación de ferrita y de perlita durante el enfriamiento de la pieza desde la temperatura de austenizado, b) obtener una matriz ausferrítica

## 2.4. Transformaciones de fase durante el TTA de tres pasos

uniforme y c) evitar la formación de carburos de hierro. Para que esto ocurra se debe seleccionar la composición química adecuada de la aleación teniendo en cuenta la influencia de los elementos de aleación y el tamaño y la geometría de la pieza. El silicio tiene un rol importante durante el tratamiento isotérmico a la temperatura de austemperizado, porque retrasa la formación de carburos de hierro en la austenita, extendiendo así el periodo ventana entre las etapas I y II [Yescas, 2001]. El molibdeno y el manganeso le confieren una gran austemperabilidad a la fundición nodular, siendo posible evitar la formación de ferrita y perlita durante el enfriamiento de la pieza desde la temperatura de austenizado hasta la de austemperizado. Como contrapartida estos elementos segregan fuertemente hacia las últimas zonas en solidificar, generando en ellas precipitaciones de carburos [Trudel and Gagné, 1997]. Por tal motivo sus concentraciones se mantienen dentro de los rangos  $0,25 < Mn < 0,5\%peso$  y  $Mo < 0,3\%peso$  [Yescas, 2001]. Otros elementos que confieren buena austemperabilidad son el cromo y el vanadio, pero no son utilizados por ser fuertes formadores de carburos [Yescas, 2001]. El níquel y el cobre por si solos no aumentan la austemperabilidad de la fundición, pero en combinación con el molibdeno y el manganeso sí lo hacen. Sus concentraciones se mantienen dentro de los rangos  $0,5 < Ni < 3,5\%peso$  y  $0,5 < Cu < 1,0\%peso$  [Yescas, 2001]. Se ha observado que añadiendo pequeñas cantidades de muchos elementos de aleación se obtiene fundiciones con mayor austemperabilidad, que añadiendo pocos en mayores cantidades.

Las microsegregaciones se generan, para la mayoría de los elementos de aleación, durante la solidificación. Como consecuencia de las microsegregaciones la matriz tiene una composición química heterogénea [Yescas, 2001], lo que ocasiona que la cinética de la transformación ausferrítica, el periodo ventana y la distribución de las subunidades sea diferente en distintos puntos de la matriz. En las regiones de la matriz ricas en solutos que retardan la transformación ausferrítica, generalmente se forma martensita cuando la pieza es enfriada hasta la temperatura ambiente; mientras que en las zonas ricas en solutos que aceleran la transformación, generalmente se forman finos precipitados de carburos de hierro en el interior de la austenita [Yescas, 2001]. Existen algunas técnicas que permiten obtener una distribución más uniforme de las subunidades a pesar de la existencia de las microsegregaciones, las cuales se detallan a continuación:

- Deformación plástica previa a la transformación ausferrítica: esta técnica que se encuentra actualmente en fase de desarrollo por, ver [Nofal et al., 2007], consiste en deformar el material mediante trabajo mecánico (forjado o rolado) cuando se encuentra a una temperatura próxima a la de austenizado. Esta deformación tiende a uniformizar la velocidad de la transformación ausferrítica en toda la matriz.
- Austenizado prolongado a elevada temperatura: este método consiste en austenizar la fundición a elevada temperatura ( $T_\gamma = 1000^\circ C$ ) durante un periodo de tiempo prolongado (3 días). De este modo se logra homogeneizar

## Capítulo 2. Fundición de hierro nodular austemperizada

las concentraciones de los aleantes en la matriz permitiendo obtener después una microestructura ausferrítica uniforme [Yescas, 2001]. Las desventajas de esta técnica son el elevado tiempo y costo de producción de piezas austemperizadas.

En la actualidad la tendencia es fabricar piezas de fundición con menores cantidades de aleantes como el molibdeno y el manganeso ya que tienden a segregarse fuertemente hacia las últimas zonas en solidificar, y con mayores cantidades de silicio, níquel y cobre ya que estos segregan hacia las primeras zonas en solidificar [Putatunda and Gadicherla, 1999].

### Influencia de los principales parámetros del tratamiento térmico

La temperatura de austenizado determina la concentración de carbono que va a tener la austenita al inicio de la transformación ausferrítica ( $c_\gamma$ ), ya que modifica la solubilidad del carbono de la misma. Mientras mayor es la temperatura de austenizado, mayor es la concentración de carbono en la austenita. Experimentalmente se ha observado que mientras menor es  $c_\gamma$ , mayores son la velocidad de la transformación ausferrítica y la fracción volumétrica de subunidades de ferrita [Yescas, 2001].

El tiempo de austenizado es importante ya que, durante este proceso, el carbono es incorporado a la austenita desde los nódulos de grafito mediante el mecanismo de difusión. Cuando el tiempo de austenizado es lo suficientemente prolongado la concentración de carbono en la matriz austenítica es homogénea e igual a  $c_\gamma = c_{\gamma/Gr}$ , siendo  $c_{\gamma/Gr}$  la concentración de carbono de equilibrio en la austenita en contacto con el grafito [Thomson et al., 2000, Yescas, 2001]. Cuando el tiempo de austenizado no es el suficiente, la concentración promedio de la austenita es menor que  $c_{\gamma/Gr}$ , lo cual modifica las fracciones de fases formadas durante la transformación ausferrítica.

La temperatura de austemperizado influye en la cinética de la transformación ausferrítica y en el tipo y la fracción volumétrica de subunidades de ferrita. Cuando la temperatura es alta se formarán subunidades de ferrita superior, mientras que si es baja lo harán las subunidades de ferrita inferior. La fracción de subunidades de ferrita aumenta cuando la temperatura de austemperizado disminuye. Esto se debe a que la concentración de carbono en la austenita  $c_{\gamma_{T_d}}$  aumenta, permitiendo que se prolongue la transformación. La velocidad de la transformación ausferrítica aumenta cuando la temperatura de austemperizado también lo hace, siendo uno de los motivos la mayor movilidad del carbono en las zonas de nucleación de las subunidades [Thomson et al., 2000, Yescas, 2001, Hupalo et al., 2012, Fraś et al., 2012].

El tiempo de austemperizado es muy importante ya que influye en el tipo de microestructura que se obtendrá al final del tratamiento térmico. Si el tiempo es demasiado corto, debido al bajo contenido de carbono en la austenita, parte de ella se transformará en martensita durante el enfriamiento hacia la temperatura ambiente. Si el tiempo es demasiado prolongado se formarán carburos de hierro en el interior de la austenita durante el tratamiento isotérmico a la temperatura de austemperizado. Para

## 2.4. Transformaciones de fase durante el TTA de tres pasos

un tiempo óptimo se obtendrá una matriz completamente ausferrítica a la temperatura ambiente [Yescas et al., 2001].

En el trabajo experimental presentado por Fra $\acute{s}$  *et al.* [Fra $\acute{s}$  et al., 2012] se observa una gran influencia del tama $\acute{n}$ o de los n $\acute{o}$ dulos de grafito en la transformaci $\acute{o}$ n ausferrítica. A medida que los n $\acute{o}$ dulos de grafito son m $\acute{a}$ s peque $\acute{n}$ os, la velocidad de la transformaci $\acute{o}$ n se incrementa.

### 2.4.4. Transformaci $\acute{o}$ n martensítica

La austenita que compone a una fundici $\acute{o}$ n de hierro nodular austemperizada puede transformarse en martensita mediante los procesos de: a) enfriamiento desde la temperatura de austemperizado hasta la temperatura ambiente y b) deformaci $\acute{o}$ n pl $\acute{a}$ stica.

Durante el enfriamiento es posible obtener martensita si la temperatura de comienzo de la transformaci $\acute{o}$ n martensítica ( $T_{MS}$ ), correspondiente a la composici $\acute{o}$ n química de la austenita, es mayor que la temperatura ambiente. Cuando la transformaci $\acute{o}$ n ausferrítica no ha finalizado, la temperatura de comienzo de la transformaci $\acute{o}$ n martensítica puede ser mayor que la temperatura ambiente, lo cual ocurre por los siguientes motivos:

- Existe una relaci $\acute{o}$ n directa entre el grado de avance de la transformaci $\acute{o}$ n ausferrítica y la concentraci $\acute{o}$ n de carbono en la austenita.
- Existe una la relaci $\acute{o}$ n inversa entre la concentraci $\acute{o}$ n de carbono en la austenita y la temperatura de comienzo de la transformaci $\acute{o}$ n martensítica. La martensita tiende a formarse mayormente en las regiones donde existe austenita con baja concentraci $\acute{o}$ n de carbono, como por ejemplo en los bloques de austenita de mayor tama $\acute{n}$ o.

Por otro lado, el proceso de deformaci $\acute{o}$ n pl $\acute{a}$ stica consiste simplemente en deformar pl $\acute{a}$ sticamente el material una vez finalizado el tratamiento t $\acute{e}$ rmino de austemperizado, induciéndose de esta forma la transformaci $\acute{o}$ n martensita [Garín and Mannheim, 2003, Guzmán et al., 2013].

En cuanto a las propiedades mecánicas, cuando en la fundici $\acute{o}$ n de hierro nodular austemperizada la austenita se transforma parcialmente en martensita, el material pierde ductilidad pero gana dureza. La formaci $\acute{o}$ n de martensita es deseada en piezas donde se requiere elevada resistencia al desgaste y baja ductilidad [Garín and Mannheim, 2003, Guzmán et al., 2013].

### Cinética de la transformaci $\acute{o}$ n martensítica

Desde el punto de vista termodinámico, la transformaci $\acute{o}$ n martensítica comienza cuando se cumple la siguiente condici $\acute{o}$ n [Shin et al., 2001, Guzmán et al., 2013]:

## Capítulo 2. Fundición de hierro nodular austemperizada

$$\Delta G^{\gamma \rightarrow m} > \Delta G_{crit} \quad (2.5)$$

donde  $\Delta G^{\gamma \rightarrow m}$  es el cambio de energía libre debido a la transformación de austenita a martensita y  $\Delta G_{crit}$  es la mínima diferencia de energía libre necesaria entre la austenita y la martensita para que comience la transformación.

La energía libre de la austenita y de la martensita dependen de la temperatura y de su composición química. En la figura 2.14 se representa la variación de la energía libre, para ambas fases, en función de la temperatura. Cuando la temperatura  $T < T_{MS}$  se cumple el criterio termodinámico para que ocurra la transformación martensítica.

La temperatura de comienzo de la transformación martensítica puede ser incrementada aumentando la energía libre de la austenita. Una de las maneras de realizarlo es mediante el incremento de la energía interna de deformación  $u_{cI}$ , ver figura 2.15, como ocurre en el mencionado proceso de deformación plástica. De esta forma la ecuación 2.5 es satisfecha a partir de una temperatura  $T_{MS}^* > T_{MS}$  [Shin et al., 2001]. La energía interna de deformación necesaria para obtener una temperatura  $T_{MS}^*$  es:

$$u_{cI} = \Delta G_{crit} - \Delta G^{\gamma \rightarrow m} \quad (2.6)$$

La energía  $u_{cI}$  está limitada ya que aplicando una deformación plástica elevada se generan agrietamientos severos en la microestructura de la fundición [Garín and Mannheim, 2003].

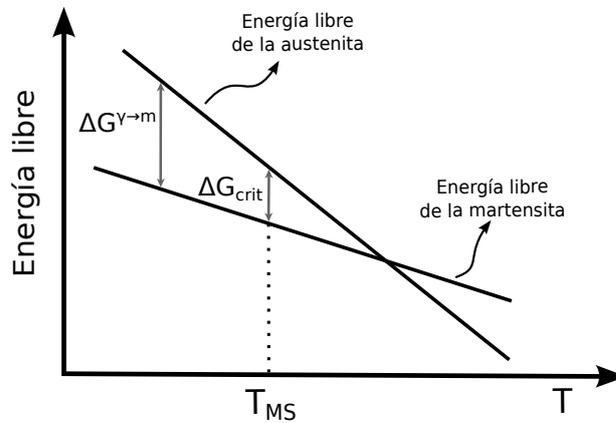


Figura 2.14: Energía libre de la austenita y de la martensita en función de la temperatura.

2.4. Transformaciones de fase durante el TTA de tres pasos

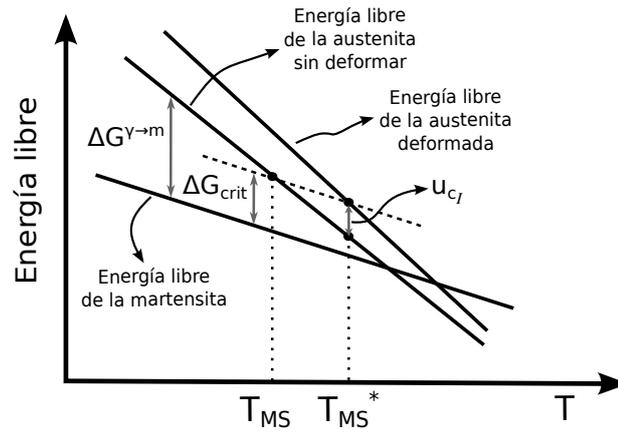


Figura 2.15: Energía libre de la austenita (con y sin deformación plástica) y de la martensita en función de la temperatura.



# Capítulo 3

## Revisión bibliográfica de modelos

### 3.1. Introducción

El modelado computacional se ha convertido en una parte importante de la ciencia de los materiales. En lo que respecta a la fundición de hierro nodular, a lo largo de los años se han desarrollado distintos modelos utilizados para simular procesos de solidificación y tratamientos térmicos. Estos han sido planteados en distintas escalas de análisis, las cuales se detallan a continuación [Stefanescu, 2009]:

- Escala macroscópica: esta escala es del orden de  $10^{-3}$  a  $10^0m$ . Alguno de los elementos que se visualizan en la macroescala son las piezas, los rechupes, las porosidades, las macrosegregaciones de los elementos de aleación y los defectos de llenados.
- Escala mesoscópica: esta escala es del orden de  $10^{-4}m$  y en ella es posible describir la microestructura sólo a nivel de los granos.
- Escala microscópica: esta escala es del orden de  $10^{-6}$  a  $10^{-5}m$ . En ella es posible hacer una descripción más detallada de la microestructura, identificando por ejemplo el tipo y el tamaño de las fases, las microsegregaciones de los elementos de aleación, entre otros.
- Escala nanoscópica: esta escala es del orden de  $10^{-9}m$  y permite describir la morfología atómica de las intercaras entre fases.

Los primeros modelos computacionales desarrollados para la fundición de hierro nodular tenían como objetivo simular el proceso de solidificación desde un punto de vista macroscópico [Celentano, 1994, Celentano et al., 1994, Stefanescu, 2009]. Estas simulaciones permiten conocer la evolución de la temperatura y de la fracción sólida en cada punto de una pieza. La predicción se realiza a partir de que el material ya ha sido colado, no considerándose el llenado del molde. La ecuación de la conservación de la energía es resuelta en la escala macroscópica y se tiene en cuenta el calor

latente de cambio de fase. El modelo de cambio de fase también es planteado en la escala macroscópica, considerando como únicas fases una líquida y una sólida (no se distinguen los nódulos de grafito de la matriz austenítica), dependiendo su evolución sólo de la temperatura. Las ecuaciones de gobierno del problema son discretizadas y resueltas en un dominio que considera tanto la pieza como el molde, mediante las técnicas de diferencias finitas o elementos finitos. Dado que los modelos macroscópicos no son capaces de predecir las características microestructurales del material, las propiedades mecánicas sólo pueden ser estimadas teniendo en cuenta variables tales como temperatura y velocidad de enfriamiento.

Los modelos planteados a escala microscópica son utilizados principalmente para predecir la cinética de las transformaciones de fase. Estos se clasifican en determinísticos, estocásticos y phase field [Stefanescu, 2009].

En los modelos determinísticos generalmente se describe la microestructura mediante un elemento de volumen representativo. Algunas de las simplificaciones clásicamente aplicadas son: fases de geometría sencillas (nódulos de grafito esféricos, halos de austenita y de ferrita con forma de casquete esféricos) y temperatura constante en todo el elemento de volumen representativo. La evolución de las fases se calcula mediante ecuaciones diferenciales o integrables. Este tipo de modelo es fácilmente acoplado a la formulación macroscópica clásica de transferencia de calor y de masa de códigos estándar de elementos finitos o de diferencias finitas.

En los modelos estocásticos se realiza una descripción gráfica más extendida de la microestructura en comparación con los modelos determinísticos. La evolución de las fases es calculada planteando reglas simples en vez de ecuaciones diferenciales o integrales. Este tipo de modelo es utilizado también para modelar la microestructura en las escalas mesoscópica y nanoscópica. Las técnicas ampliamente utilizadas en el modelado estocástico son el método de Montecarlo y el autómata celular.

El modelo phase field resuelve dos ecuaciones diferenciales parciales parabólicas. Una de las ecuaciones diferenciales puede ser la ecuación de la conservación del soluto o de la energía, mientras que la otra ecuación es la de campo de fase que permite determinar el tipo de fase presente. Este tipo de modelo es utilizado, por ejemplo, para simular la cinética de crecimiento de una dendrita teniendo en cuenta su orientación cristalina. Debido a la gran cantidad de recurso computacional que requiere esta técnica, el estudio se realiza analizando pequeños dominios [Stefanescu, 2009].

En la actualidad son cada vez más los modelos computacionales que tratan los problemas de cambios de fase acoplando distintos tipos de físicas, las cuales son planteadas en distintas escalas [Dardati et al., 2006, Celentano et al., 2008, Carazo et al., 2012]. En la escala macroscópica las leyes matemáticas de conservación de masa, de cantidad de movimiento, de energía y de especies permiten conocer los campos de velocidad, de presión, de temperatura y de composición química. En la escala microscópica se determinan características propias de la microestructura tales como el tamaño y la densidad de granos, las fracciones de fases, el espaciamiento entre dendritas primarias y secundarias, entre otras, imposibles de predecir con modelos planteados

solamente a escala macroscópica. El acoplamiento entre la ecuación de la energía a nivel macroscópico y los modelos metalúrgicos microscópicos se realiza utilizando diferentes métodos como por ejemplo *temperature recovery* [Zhao and Liu, 2001], entalpía [Fredriksson and Svensson, 1984, Stefanescu and Kanetkar, 1985, Yoo et al., 1999] y calor latente [Chang et al., 1991, Wenzhen and Baicheng, 1996, Liu and R., 1998]. Utilizando modelos capaces de predecir aspectos microestructurales, es posible obtener las propiedades mecánicas del material a través de la relación que existe entre microestructura y propiedades mecánicas [Thomson et al., 2000, Carazo et al., 2014, Rodriguez et al., 2015].

## 3.2. Modelado computacional del tratamiento térmico de austemperizado *de tres pasos*

En esta sección se presentan los principales modelos encontrados en la literatura y que son utilizados para simular los distintos cambios de fase que intervienen en el tratamiento térmico de austemperizado *de tres pasos*.

### 3.2.1. Modelos de la transformación eutectoide inversa

La transformación eutectoide inversa es el cambio de fase que se produce durante el calentamiento de la fundición nodular. En esta transformación la matriz inicial del material se transforma en austenita. El cambio de fase de ferrita a austenita se denomina eutectoide inverso estable mientras que el cambio de fase de perlita a austenita es llamado eutectoide inverso metaestable. A continuación se describen los principales modelos de la transformación eutectoide inversa de una fundición nodular hallados en la literatura.

El modelo desarrollado por Batra *et al.* [Batra et al., 2005] predice el tiempo necesario para que la transformación eutectoide inversa estable finalice. Este modelo considera a todos los nódulos de grafitos de igual tamaño y rodeados de un halo de ferrita. El nódulo de grafito actúa como proveedor de carbono el cual es cedido a la matriz durante la transformación.

Los autores modelan la transformación eutectoide inversa estable a través de un elemento de volumen representativo esférico que inicialmente está compuesto por un nódulo de grafito rodeado de un halo de ferrita. Cuando el modelo llega a la temperatura de cambio de fase, se produce la nucleación de un halo de austenita en la superficie del nódulo de grafito. El crecimiento del halo se modela como un proceso gobernado por la difusión de carbono de largo alcance, en el cual el carbono migra desde el grafito hacia la ferrita. La variación del tamaño del nódulo de grafito durante la transformación es despreciada.

La ecuación que gobierna el crecimiento de la austenita propone que el flujo de carbono en la intercara austenita-ferrita, proveniente del nódulo de grafito, es igual a

### Capítulo 3. Revisión bibliográfica de modelos

la variación del contenido total de carbono del halo de austenita respecto del tiempo:

$$-4\pi r^2 D_\gamma \rho_\gamma \frac{dc_\gamma}{dr} \Big|_{r_{Gr}+l_\gamma} = \frac{dcT_\gamma}{dt} \quad (3.1)$$

donde  $D_\gamma$  es el coeficiente de difusión de carbono en la austenita,  $\rho_\gamma$  es la densidad de la austenita,  $c_\gamma$  es la concentración de carbono de la austenita en función del radio y  $cT_\gamma$  es la concentración promedio de carbono de la austenita.

El tiempo necesario para que la transformación finalice es obtenido integrando la ecuación 3.1:

$$t_\gamma = \frac{c_{\gamma/Gr} l_{\gamma max}^2}{6D_\gamma (c_{\gamma/Gr} - c_{\gamma/\alpha})} + \frac{c_{\gamma/\alpha} l_{\gamma max}^2}{3D_\gamma (c_{\gamma/Gr} - c_{\gamma/\alpha})} \left( \frac{l_{\gamma max} + r_{Gr}}{r_{Gr}} \right) \quad (3.2)$$

donde  $l_{\gamma max}$  es el espesor del halo de austenita cuando la transformación ha finalizado,  $r_{Gr}$  es la radio del nódulo de grafito, mientras que  $c_{\gamma/Gr}$  y  $c_{\gamma/\alpha}$  son las concentraciones de equilibrio de carbono en la austenita en contacto con el grafito y con la ferrita, respectivamente.

El modelo propuesto por Kapturkiewicz *et al.* [Kapturkiewicz et al., 2005] simula la cinética de la transformación eutectoide inversa metaestable, considerando que todas las colonias de perlita tienen el mismo espaciado interlaminar. El modelo describe la geometría de la perlita mediante un elemento de volumen representativo unidimensional definido en sentido transversal de las láminas, el cual está formado por medio espesor de lámina de ferrita y medio espesor de lámina de cementita.

Cuando el material llega a la temperatura de cambio de fase, una delgada lámina de austenita nuclea en la intercara ferrita-cementita. El crecimiento de la austenita está gobernado por la difusión de carbono de largo alcance desde la cementita hacia la ferrita. Se considera que la concentración de carbono en la cementita es constante e igual a 6,67%*peso*, mientras que en la ferrita y en la austenita existe un gradiente de concentración de carbono que es el causante del desplazamiento de las intercaras.

La ecuación de balance de masa de carbono en la intercara móvil cementita-austenita es:

$$D_\gamma \rho_\gamma \frac{dc_\gamma}{dz} \Big|_{z_{\theta/\gamma}} = \dot{z}_{\theta/\gamma} (c_\theta \rho_\theta - c_{\gamma/\theta} \rho_\gamma) \quad (3.3)$$

Mientras que la ecuación de balance de masa de carbono en la intercara móvil austenita-ferrita es:

$$D_\alpha \rho_\alpha \frac{dc_\alpha}{dz} \Big|_{z_{\gamma/\alpha}} - D_\gamma \rho_\gamma \frac{dc_\gamma}{dz} \Big|_{z_{\gamma/\alpha}} = \dot{z}_{\gamma/\alpha} (c_{\gamma/\alpha} \rho_\gamma - c_{\alpha/\gamma} \rho_\alpha) \quad (3.4)$$

donde  $D_\alpha$  y  $D_\gamma$  son los coeficientes de difusión de carbono en la ferrita y en la austenita, respectivamente;  $\rho_\alpha$ ,  $\rho_\gamma$  y  $\rho_\theta$  son las densidades de la ferrita, la austenita y la cementita, respectivamente;  $\dot{z}_{\theta/\gamma}$  y  $\dot{z}_{\gamma/\alpha}$  son las velocidades de las intercaras cementita-austenita y

### 3.2. Modelado computacional del TTA de tres pasos

austenita-ferrita, respectivamente;  $c_\theta$  es la concentración de carbono en la cementita; y por último,  $c_{\gamma/\theta}$ ,  $c_{\gamma/\alpha}$  y  $c_{\alpha/\gamma}$  son las concentraciones de equilibrio de carbono en la austenita en contacto con la cementita, en la austenita en contacto con la ferrita y en la ferrita en contacto con la austenita, respectivamente.

El modelo de cambio de fase fue acoplado a un modelo térmico planteado en la escala macroscópica. El acoplamiento permite considerar los coeficientes de difusión de carbono y las concentraciones de equilibrio de carbono dependientes de la temperatura, como así también la generación de calor latente por cambio de fase.

#### 3.2.2. Modelos de la transformación ausferrítica

La mayoría de las publicaciones relacionadas con la fundición de hierro nodular austemperizada son del tipo experimental [Verhoeven et al., 1990, Lin et al., 1995, Bahmani et al., 1997, Taran et al., 1997, Yescas, 2001, Yescas et al., 2001, Bosnjak et al., 2001, Chang, 2003, Batra et al., 2003a, Batra et al., 2003b, Batra et al., 2004, Kiani-Rashid, 2009, Amran et al., 2010, Fraś and Górnny, 2010, Kumar et al., 2011, Fraś et al., 2012, Hupalo et al., 2012, Meier et al., 2013, Górnny et al., 2014, Kočański et al., 2014, Krzyńska and Kočański, 2014]; en ellas se caracterizan la cinética de la transformación, la microestructura obtenida a la temperatura ambiente y las propiedades mecánicas. Son pocos los trabajos dedicados al modelado matemático de la transformación ausferrítica. A continuación se describen los principales modelos encontrados en la literatura.

El proceso de austemperizado *in situ* es simulado por Yoo *et al.* [Yoo et al., 1999] modelando la evolución de la fracción de ausferrita desde un punto de vista macroscópico con la ley de Avrami:

$$f_{Ausf} = f_{Ausfmax}[1 - \exp(-ct^n)] \quad (3.5)$$

donde  $f_{Ausfmax}$  es la máxima fracción en volumen de ausferrita que puede formarse,  $t$  es el tiempo, mientras que  $c$  y  $n$  son los parámetros de la ley de Avrami.

Los parámetros  $c$  y  $n$  son determinados a partir de ensayos experimentales mediante ajuste de curvas tiempo-temperatura-transformación. Es importante remarcar que los parámetros dependen de la composición química, de las temperaturas de austenizado y austemperizado, y del tamaño de los nódulos de grafito. Por tal motivo, para poder expresar los parámetros en función de estas variables es necesario utilizar una gran cantidad de ensayos experimentales.

El modelo de cambio de fase es acoplado con un modelo térmico planteado en la escala macroscópica. Debido a que es posible que la transformación ausferrítica comience antes de llegar a la temperatura de austemperizado, es necesario utilizar la regla de la aditividad para resolver la ecuación 3.5.

La evolución de las fracciones de subunidades de ferrita y de la austenita no son computadas, por lo tanto el modelo no podría ser acoplado con aquellos que determinan:

### Capítulo 3. Revisión bibliográfica de modelos

- Las propiedades mecánicas al final del tratamiento en función de las fracciones de subunidades de ferrita y de austenita [Thomson et al., 2000].
- La fracción de martensita durante el enfriamiento hasta la temperatura ambiente [Yescas and Bhadeshia, 2002].

El modelo desarrollado por Kapturkiewicz *et al.* [Kapturkiewicz et al., 2003] simula la evolución de la fracción de subunidades de ferrita. La nucleación continua de subunidades no tiene en cuenta sitios de nucleación preferenciales tales como la superficie de los nódulos de grafito y las puntas de las subunidades ya existentes. En cuanto al crecimiento de las subunidades, a diferencia de la mayoría de los modelos encontrados en la literatura para la transformación ausferrítica, se propone un mecanismo de crecimiento basado en la difusión de carbono de largo alcance.

La tasa de nucleación  $N_\alpha$  es modelada fenomenológicamente utilizando una ley sigmonidal tipo Avrami:

$$N_\alpha = N_{\alpha^{max}}[1 - \exp(-c_1 t^{n_1})] \quad (3.6)$$

donde  $t$  es el tiempo; mientras que  $N_{\alpha^{max}}$ ,  $c_1$  y  $n_1$  son parámetros que se obtienen ajustando la ley con datos experimentales.

La evolución del espesor de las subunidades es calculada utilizando un modelo de difusión unidimensional, el cual considera una sola subunidad de ferrita embebida en una matriz de austenita de dimensiones infinitas, despreciando la acción de los nódulos de grafito. La velocidad de crecimiento del espesor es calculada mediante la ecuación de balance de masa de carbono en la intercara móvil ferrita-austenita:

$$\frac{dz}{dt} = \frac{D_\gamma \frac{dx_\gamma}{dz} - D_\alpha \frac{dx_\alpha}{dz}}{x_{\alpha/\gamma} - x_{\gamma/\alpha}} \quad (3.7)$$

donde  $D_\alpha$  y  $D_\gamma$  son los coeficientes de difusión de carbono en la ferrita y en la austenita, respectivamente. Además,  $x_{\alpha/\gamma}$  y  $x_{\gamma/\alpha}$  son las concentraciones de carbono de paraequilibrio en la ferrita en contacto con la austenita y en la austenita en contacto con la ferrita, respectivamente, expresadas ambas en fracción molar.

El modelo de crecimiento desprecia el intercambio de carbono entre los nódulos de grafito y la matriz. Además, no distingue las distintas regiones ocupadas por la austenita como las láminas y los bloques, las cuales durante la transformación tienen diferentes concentraciones de carbono. En los casos estudiados por los autores del modelo, los parámetros de la ley de nucleación resultaron ser variables con la temperatura de austemperizado. El modelo no tiene en cuenta el efecto del tamaño de los nódulos de grafito en la cinética de crecimiento de la ausferrita, sin embargo, se espera que los parámetros también varíen con esta variable. Por tal motivo se requeriría de una gran cantidad de ensayos experimentales para poder ajustar los parámetros en función de estas dos variables, y de otras que influyen en

### 3.2. Modelado computacional del TTA de tres pasos

la transformación, tales como la composición química y la temperatura de austenizado.

El modelo propuesto por Thomson *et al.* [Thomson et al., 2000] predice la evolución de la fracción de subunidades de ferrita adaptando un modelo desarrollado por Rees y Bhadeshia para aceros bainíticos [Rees and Bhadeshia, 1992a], que considera nucleación continua y crecimiento displacivo de las subunidades.

La evolución de la fracción en volumen de subunidades de ferrita es calculada con la siguiente ecuación diferencial:

$$\frac{df_{\alpha p}}{dt} = (1 - \xi)u_{\alpha p}I \quad (3.8)$$

donde  $u_{\alpha p}$  es el volumen de una subunidad de ferrita,  $I$  es la cantidad de subunidades que nuclean por unidad de tiempo y de volumen. Además,  $\xi = f_{\alpha p}/\vartheta$  es un coeficiente que permite tener en cuenta la reducción de los sitios de nucleación a medida que la transformación avanza, en el cual  $\vartheta$  es la máxima fracción en volumen que puede formarse de subunidades de ferrita durante la transformación ausferrítica.

La nucleación de las subunidades es del tipo continua y no considera la nucleación en la superficie de los nódulos de grafito:

$$I = (1 + \beta_m f_{\alpha p})I_o \quad (3.9)$$

$$I_o = k_1^{dm} \exp \left[ -\frac{1}{RT} \left( k_1^{dm} + \frac{k_2^{dm} \Delta G_m}{k_3^{dm}} \right) \right] \quad (3.10)$$

donde  $\Delta G_m$  es la máxima energía libre disponible para la nucleación en condiciones de paraequilibrio,  $k_1^{dm}$  y  $k_2^{dm}$  son parámetros, mientras que  $k_3^{dm} = 2540 J/mol$  y  $R$  es la constante universal de los gases.

La función  $\beta_m$  permite tener en cuenta la nucleación autocatalítica y la disminución de los sitios de nucleación por el apilamiento de carbono en la intercara ferrita-austenita. Los autores reemplazaron la función  $\beta_m$  propuesta para aceros bainíticos por la siguiente:

$$\beta_m = \frac{\lambda_1}{\exp(2\lambda_2 c_\gamma)} \quad (3.11)$$

donde  $\lambda_1$  y  $\lambda_2$  son parámetros y  $c_\gamma$  es la concentración de carbono en la austenita al comienzo de la transformación ausferrítica.

Los parámetros de las ecuaciones 3.10 y 3.11 dependen de las temperaturas de austenizado y austemperizado, de la composición química de la fundición y del tamaño de los nódulos de grafito. Ajustar el modelo considerando el efecto de todas estas variables, al igual que ocurre con los modelos antes descriptos, requiere de un gran número de ensayos experimentales.

La máxima energía libre disponible para la nucleación es modelada teniendo en cuenta el enriquecimiento de carbono en la austenita, el cual ocurre a medida que la

### Capítulo 3. Revisión bibliográfica de modelos

transformación avanza. Como el modelo no cuantifica la concentración de carbono en la austenita,  $\Delta G_m$  es propuesta como una función lineal del coeficiente  $\xi$ :

$$\Delta G_m = \Delta G_m^o - \xi(\Delta G_m^o - G_n) \quad (3.12)$$

donde  $\Delta G_m^o$  es la máxima energía libre disponible para la nucleación al comienzo de la transformación ausferrítica. Para calcular  $\Delta G_m^o$  se considera que la composición química de la matriz es homogénea.

El modelo propuesto por Yescas *et al.* [Yescas, 2001, Yescas and Bhadeshia, 2002] predice la máxima fracción volumétrica de subunidades de ferrita, que se formará al completarse la transformación ausferrítica. El modelo considera que la composición química de la matriz es homogénea al inicio de la transformación y que la finalización de la transformación ocurre cuando la concentración de carbono en la austenita alcanza el valor de  $c_{\gamma_{T_o'}}$ .

Las fracciones en volumen de subunidades de ferrita  $\vartheta$  y austenita  $\Gamma$ , respecto del volumen de la matriz, cumplen con la siguiente ecuación:

$$1 = \vartheta + \Gamma \quad (3.13)$$

Realizando el balance de masa de carbono en la matriz, despreciando el intercambio de carbono entre la matriz y los nódulos de grafito, se tiene:

$$c_\gamma \rho_\gamma = \vartheta \rho_{\alpha p} c_{\alpha p} + \Gamma \rho_{\gamma_{T_o'}} c_{\gamma_{T_o'}} \quad (3.14)$$

donde  $c_\gamma$  y  $c_{\gamma_{T_o'}}$  son las concentraciones de carbono de la austenita al comienzo y al final de la transformación ausferrítica, respectivamente, y  $c_{\alpha p}$  es la concentración de carbono de las subunidades de ferrita. Además,  $\rho_\gamma$  y  $\rho_{\gamma_{T_o'}}$  son las densidades de la austenita al comienzo y al final de la transformación ausferrítica, respectivamente, y  $\rho_{\alpha p}$  es la densidad de las subunidades de ferrita. Todas las concentraciones son en *%peso*.

Resolviendo el sistema compuesto por las ecuaciones 3.13 y 3.14, la máxima fracción en volumen de subunidades de ferrita al final de la transformación ausferrítica es:

$$\vartheta = \frac{c_{\gamma_{T_o'}} \rho_{\gamma_{T_o'}} - c_\gamma \rho_\gamma}{c_{\gamma_{T_o'}} \rho_{\gamma_{T_o'}} - c_{\alpha p} \rho_{\alpha p}} \quad (3.15)$$

Cuando las subunidades están formadas solamente por ferrita, su concentración de carbono es aproximadamente constante con la temperatura. Cuando las subunidades están formadas además por finos precipitados de carburos de hierro su concentración de carbono global aumenta y se vuelve dependiente de la temperatura de austemperizado. Cuando la temperatura disminuye la cantidad de carburos aumenta, por lo tanto la concentración de carbono global de la subunidad también aumenta.

El modelo propuesto por Ławrynowicz *et al.* [Ławrynowicz and Dymki, 2007, Ławrynowicz and Dymki, 2008] predice el tiempo de descarburación de una subunidad

### 3.2. Modelado computacional del TTA de tres pasos

de ferrita. El modelo considera una subunidad de ferrita, de longitud infinita, embebida en una matriz austenítica también de dimensiones infinitas. La difusión de carbono es unidireccional y perpendicular a la intercara ferrita-austenita, sin considerar la influencia de los nódulos de grafito.

Por medio de la difusión de carbono desde la subunidad de ferrita hacia la austenita se reduce la concentración de carbono en la ferrita. El tiempo de difusión necesario para que todo el carbono que la ferrita tiene en exceso migre a la austenita se denomina tiempo de descarburación ( $t_d$ ). Debido a que el coeficiente de difusión de carbono en la ferrita es mayor que el coeficiente de difusión de carbono en la austenita, para el tiempo  $t_d$  la concentración de carbono en la ferrita es homogénea e igual a la concentración de carbono de paraequilibrio  $x_{\alpha/\gamma}$ ; mientras que en la austenita existe un gradiente en la concentración de carbono. Dicho gradiente mueve el carbono desde la intercara ferrita-austenita hacia las zonas más alejadas de la matriz austenítica, sin cambiar el espesor de la subunidad.

Aplicando el balance de masa de carbono en todo el dominio para el tiempo  $t_d$ , considerando paraequilibrio en la intercara ferrita-austenita y un ancho infinito de la matriz de austenita, se tiene:

$$\frac{w_{\alpha p}(\bar{x}_{\gamma} - x_{\alpha/\gamma})}{2} = \int_{z=0}^{\infty} [x_{\gamma}(z) - \bar{x}_{\gamma}] dz \quad (3.16)$$

donde  $w_{\alpha p}$  es el espesor de la subunidad,  $\bar{x}_{\gamma}$  es la concentración de carbono en la austenita y la ferrita después del crecimiento de la subunidad y antes de que comience el proceso de difusión, y  $x_{\gamma}$  es la concentración de carbono en la austenita durante el proceso de difusión, la cual varía con la posición  $z$ . Todas las concentraciones de carbono están expresadas en fracción molar.

Finalmente, el tiempo de descarburación es:

$$t_d = \frac{\pi w_{\alpha p}^2}{16 \bar{D}_{\gamma}} \left( \frac{\bar{x}_{\gamma} - x_{\alpha/\gamma}}{x_{\gamma/\alpha} - \bar{x}_{\gamma}} \right)^2 \quad (3.17)$$

donde  $x_{\gamma/\alpha}$  es la concentración de carbono de paraequilibrio en la austenita en contacto con la ferrita y  $\bar{D}_{\gamma}$  es el coeficiente promedio de difusión de carbono en la austenita. Este coeficiente promedio es utilizado porque el coeficiente de difusión es muy sensible a la concentración de carbono en la austenita.  $\bar{D}_{\gamma}$  es determinado mediante la siguiente ecuación [Takahashi and Bhadeshia, 1990]:

$$\bar{D}_{\gamma} = \int_{\bar{x}_{\gamma}}^{x_{\gamma/\alpha}} \frac{D_{\gamma} dx}{(x_{\gamma/\alpha} - \bar{x}_{\gamma})} \quad (3.18)$$

El tiempo de descarburación es sensible al espesor de la subunidad y al coeficiente de difusión de carbono en la austenita. Mientras mayor es el espesor, mayor es el tiempo de descarburación. Por otro lado mientras mayor es el coeficiente de difusión de carbono en la austenita, menor es el tiempo de descarburación.

### 3.2.3. Modelos de la transformación martensítica

Existen pocos trabajos que predicen la transformación martensítica en una fundición de hierro nodular austemperizada [Thomson et al., 2000, Yescas and Bhadeshia, 2002, Guzmán et al., 2013]. A continuación se describen los principales modelos propuestos por diferentes autores:

El modelo presentado por Yescas *et al.* [Yescas and Bhadeshia, 2002] predice la fracción de martensita formada cuando la fundición es enfriada desde la temperatura de austemperizado hasta la temperatura ambiente. Para ello, la temperatura de comienzo de la transformación martensítica ( $T_{MS}$ ) se evalúa considerando que la concentración de carbono en la austenita es homogénea. Cuando dicha temperatura es mayor que la temperatura ambiente se calcula la fracción en volumen de martensita utilizando dos posibles ecuaciones. La primera ecuación (3.19) proviene de un modelo que considera a la transformación martensítica como atérmica [Koistinen and Marburger, 1959]. La segunda ecuación (3.20) proviene de un modelo que considera, además, el efecto autocatalítico de la nucleación de martensita [Khan and Bhadeshia, 1990].

$$1 - f_{\gamma \rightarrow m} = \exp[-c_2(T_{MS} - T)] \quad (3.19)$$

$$\frac{-\ln(1 - f_{\gamma \rightarrow m})}{f_{\gamma \rightarrow m}} = 1 + c_3(T_{MS} - T) \quad (3.20)$$

donde  $f_{\gamma \rightarrow m}$  es la fracción en volumen de martensita, respecto del volumen que tiene la austenita al comienzo de la transformación martensítica. Por otro lado,  $c_2$  y  $c_3$  son parámetros de los modelos.

Guzmán *et al.* [Guzmán et al., 2013] proponen predecir la formación de martensita, inducida por la deformación plástica, utilizando dos modelos desarrollados para aceros.

El primer modelo es el propuesto por Olson y Cohen [Olson and Cohen, 1975], el cual se basa en el mecanismo de intersección de bandas de deslizamiento. Las intersecciones de bandas de deslizamiento en la austenita actúan como sitios efectivos para la nucleación de la martensita. El modelo considera que el número de intersecciones de bandas es proporcional a la deformación plástica macroscópica. La fracción en volumen de martensita es igual a:

$$f_{\gamma \rightarrow m} = 1 - \exp\{-\beta_1[1 - \exp(-\alpha_1 \varepsilon_p)]^{n_2}\} \quad (3.21)$$

donde  $\varepsilon_p$  es la deformación plástica macroscópica, mientras que  $n_2$ ,  $\alpha_1$  y  $\beta_1$  son parámetros que se obtienen ajustando el modelo.  $\alpha_1$  representa la velocidad de formación de las bandas de deslizamiento cuando la deformación plástica es pequeña y  $\beta_1$  es proporcional a la probabilidad de formación de un embrión de martensita en una intersección de bandas, dependiendo ambos parámetros de la temperatura a la que se realiza la deformación.

### 3.3. Necesidad de un nuevo modelo

El segundo modelo es el propuesto por Shin *et al.* [Shin et al., 2001], el cual se basa en la relajación de energía interna. Según este modelo, durante el proceso de deformación plástica se acumula energía interna en la austenita, que es liberada cuando se produce la transformación martensítica; es decir que la transformación es como un proceso continuo de relajación de la energía interna acumulada. La fracción en volumen de martensita es igual a:

$$f_{\gamma \rightarrow m} = f_{\gamma \rightarrow m_d}^{max} \{1 - \exp[-\beta_2(\varepsilon_p - \varepsilon_o)^{n_3}]\} \quad (3.22)$$

donde  $f_{\gamma \rightarrow m_d}^{max}$  es la máxima fracción en volumen de martensita que puede transformarse por deformación plástica,  $\varepsilon_p$  es la deformación plástica macroscópica,  $\varepsilon_o$  es la mínima deformación plástica macroscópica para comenzar la transformación martensítica, mientras que  $\beta_2$  y  $n_3$  son parámetros que se obtienen ajustando el modelo.  $\beta_2$  está asociado a la estabilidad de la austenita y  $n_3$  representa la velocidad de formación de núcleos de martensita durante el proceso de deformación. El parámetro  $\beta_2$  depende de la composición química y de la temperatura a la cual se realiza la deformación plástica. El parámetro  $n_3$  depende de la composición química y del tipo de deformación a la que está sometido el material. Por ejemplo, para las fundiciones de hierro nodular austemperizadas estudiadas por Guzmán *et al.* [Guzmán et al., 2013], este parámetro varía entre 1,4 y 1,5, cuando la deformación se realiza en modo compresión (laminado).

### 3.3. Necesidad de un nuevo modelo

La mayoría de los modelos de tratamientos térmicos encontrados en la literatura son capaces de simular sólo una de las diversas transformaciones de fase que pueden ocurrir en cada etapa del proceso. Esto resta generalidad al modelo, limitando su uso a aquellos casos en los que la temperatura evoluciona de una manera determinada. En general, el cumplimiento de esta condición podría anticiparse al cálculo, con cierta certeza, sólo para piezas pequeñas y de geometría sencilla. Sin embargo, es usual que las piezas obtenidas por colada y moldeo tengan formas complejas y varios espesores lo que determina que las velocidades de cambio de temperatura difieran de una zona a otra. Los puntos ubicados en la superficie de la pieza son los que presentan mayores velocidades de cambio de temperatura mientras que los puntos internos son los que más tardan en calentarse o enfriarse.

Los modelos encontrados, del tipo térmico-metalúrgico, permiten simular los cambios de fase que ocurren en algunas de las etapas del tratamiento térmico, tales como el austenizado [Kapturkiewicz et al., 2005] o el enfriamiento desde la temperatura de austenizado hasta la temperatura de austemperizado [Yoo et al., 1999]. Se considera necesario contar con un modelo que incorpore también el aspecto mecánico del problema y que, además, permita simular la totalidad del ciclo térmico del tratamiento de austemperizado *de tres pasos*, los cambios de fases que en él ocurren y las

### Capítulo 3. Revisión bibliográfica de modelos

deformaciones ocasionadas por los cambios de temperatura y de fase.

A continuación se describen los principales motivos por los cuales se considera necesario el desarrollo de nuevos modelos para cada uno de los cambios de fase involucrados en el tratamiento de austemperizado *de tres pasos*:

*Transformación eutectoide inversa*: no se han reportado modelos que permitan simular la cinética del crecimiento de las fases considerando una matriz inicial formada por distintas cantidades de ferrita y perlita. Las matrices utilizadas como punto de partida en los tratamientos térmicos de austemperizado *de tres pasos* generalmente son ferrítica-perlítica, motivo por el cual se considera importante el desarrollo de un nuevo modelo que permita tener en cuenta distintas fracciones de las fases mencionadas, incluidas matrices totalmente ferríticas o totalmente perlíticas.

*Transformación ausferrítica*: desde el punto de vista de esta tesis, los modelos encontrados en la literatura emplean en su formulación un gran número de parámetros, en especial aquellos que consideran un mayor número de detalles. El ajuste de dichos parámetros requiere de la realización de gran cantidad de ensayos experimentales, ya que dependen de aspectos que no han sido incluidos de manera explícita en el modelo, tales como cantidad y distribución de tamaño de nódulos de grafito, temperaturas de austenizado y/o austemperizado, composición química de la fundición, entre otros. Por otro lado, estos modelos simplifican de manera excesiva la microestructura no considerando, por ejemplo, la distribución de las fases ni la concentración heterogénea del carbono en la austenita, factores estos que influyen en la cinética de crecimiento de las nuevas fases. Por lo aquí comentado, se considera necesario desarrollar un nuevo modelo que tenga en cuenta a) la distribución de las fases en la microestructura, b) la distribución de carbono en la austenita y c) la influencia de las distintas variables que intervienen en el tratamiento; todo esto utilizando el menor número de parámetros posibles, lo que permitirá reducir el número de ensayos requeridos para ajustar el modelo.

*Transformación martensítica*: se considera apropiado utilizar los modelos encontrados en la literatura para aquellos casos en los que la transformación martensítica se inicia una vez que la transformación ausferrítica ha finalizado porque, en dicha circunstancia, la concentración de carbono en la austenita es homogénea; pero no así cuando ésta no se ha desarrollado por completo porque, en ese caso, la concentración en la austenita es heterogénea. Por tal motivo, y para aumentar la flexibilidad del modelo, es importante contar con una nueva representación, que permita simular la transformación martensítica tanto cuando la concentración de carbono de la austenita es homogénea como cuando no lo es.

# Capítulo 4

## Características generales del modelo termomecánico-metalúrgico propuesto

### 4.1. Introducción

En este Capítulo se presentan las características generales del modelo termomecánico-metalúrgico empleado para simular el tratamiento térmico de austemperizado *de tres pasos* de una fundición de hierro nodular, poniendo especial atención en la descripción de los modelos mecánico y térmico y en la forma de acoplamiento de los tres aspectos (térmico, mecánico y metalúrgico) abordados en la representación del proceso. En cuanto al modelo metalúrgico, aquí se realiza una breve descripción del mismo, dejando para el Capítulo 5 la explicación detallada de los modelos de cambio de fase que constituyen la contribución original más importante de esta tesis.

En la figura 4.1 se esquematiza el ciclo térmico del tratamiento de austemperizado *de tres pasos* de una fundición de hierro nodular. Este ciclo cuenta con un calentamiento desde la temperatura ambiente hasta la temperatura de austenizado, durante el cual la matriz inicial de tipo ferrítica, ferrítica-perlítica o perlítica se transforma en una matriz austenítica mediante la transformación eutectoide inversa (región 1). Después de mantener la pieza a temperatura de austenizado el tiempo necesario, la misma se somete a un enfriamiento rápido hasta la temperatura de austemperizado. La pieza es mantenida un cierto tiempo a dicha temperatura para que la transformación ausferrítica se desarrolle isotérmicamente (región 2). Por último, se realiza el enfriamiento de la pieza hasta la temperatura ambiente, durante el cual puede tener lugar la transformación martensítica (región 3).

El modelo termomecánico-metalúrgico considera dos escalas de análisis: en la escala macroscópica se resuelven los problemas térmico y mecánico, los cuales permiten cuantificar la evolución de la temperatura y de las deformaciones en la pieza, mientras que en la escala microscópica se resuelve el modelo metalúrgico para cuantificar la evolución de las fases que componen a la microestructura del material. Este

modelo tiene en cuenta las distintas transformaciones de fase que ocurren durante el tratamiento térmico de austemperizado *de tres pasos* siendo ellas: la eutectoide inversa (estable y metaestable), la ausferrítica y la martensítica.

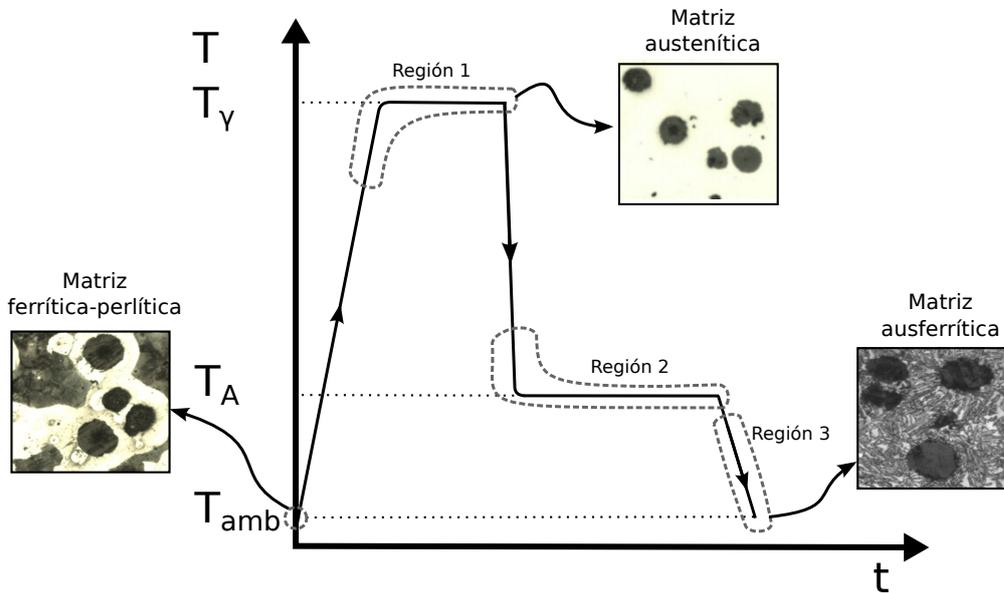


Figura 4.1: Ciclo térmico modelado del tratamiento térmico de austemperizado *de tres pasos*.

La formulación termomecánica se encuentra implementada en un programa de elementos finitos académico, que ya ha sido utilizado para modelar el proceso de solidificación de distintos tipos de aleaciones metálicas y que permite la incorporación de nuevos modelos metalúrgicos [Celentano, 1994]. Como alternativa, se utiliza también un programa de elementos finitos comercial de propósito general que permite la incorporación del modelo metalúrgico mediante subrutinas de usuario. En el Apéndice C se encuentra detallada la implementación del modelo metalúrgico en el programa comercial.

## 4.2. Interacción entre los problemas térmico, mecánico y metalúrgico

El tratamiento térmico de austemperizado es un problema complejo, ya que en él se producen fenómenos de distinta naturaleza. Una forma de estudio aceptada en tales casos, es analizar cada aspecto del proceso por separado y luego acoplarlos teniendo en cuenta las interacciones que existen entre ellos. En el modelo propuesto en esta tesis, los aspectos del problema considerados son el térmico, el mecánico y el metalúrgico.

El problema térmico trata la evolución de la temperatura en todo el volumen de la pieza y también permite aplicar el ciclo térmico a simular. El problema mecánico

## 4.2. Interacción entre los problemas térmico, mecánico y metalúrgico

evalúa las tensiones y deformaciones ocasionadas por el cambio de temperatura durante el calentamiento y enfriamiento de la pieza, y por los cambios de fase. Por último, el problema metalúrgico predice la evolución de las distintas fases que intervienen en el tratamiento. Los problemas térmico y mecánico se resuelven en la escala macroscópica, donde la pieza es considerada como un medio continuo en el que no es posible distinguir las fases; mientras que el problema metalúrgico se resuelve en la escala microscópica, en la cual es posible identificar algunas características importantes de la microestructura del material, pudiendo considerarse de esta manera el efecto de las mismas en el desarrollo de los cambios de fase.

La interacción entre los distintos tipos de problemas tiene un rol importante, porque le permite al modelo termomecánico-metalúrgico tener en cuenta determinados efectos que de otra manera sería muy difícil o imposible considerar. Por tal motivo, en esta tesis se definen las interacciones necesarias para considerar los efectos que se dan particularmente en el tratamiento térmico de austemperizado. Los tipos de interacciones y los propósitos de las mismas se describen a continuación, mientras que su representación esquemática se encuentra en la figura 4.2:

*Interacción 1:* mediante esta interacción el modelo mecánico recibe información de la evolución de la temperatura en los distintos puntos de la pieza. Con este tipo de información es posible determinar las deformaciones y tensiones térmicas, y considerar el ablandamiento térmico y el cambio de rigidez del material cuando varía la temperatura. Estos efectos tienen que ser considerados porque el modelo predice las deformaciones en la pieza, y además, porque las variaciones del módulo de Young y de la tensión de fluencia son importantes dentro del rango en el que varía la temperatura cuando se realiza el tratamiento térmico.

*Interacción 2:* por medio de esta interacción el modelo térmico recibe información de la evolución de la deformación de la pieza. De esta manera el problema térmico tiene en cuenta, para los distintos puntos de la pieza, la cantidad de calor generada por dicha deformación. El modelo presentado en esta tesis no considera esta interacción porque durante el tratamiento térmico de austemperizado el cambio de volumen y el trabajo plástico son bajos como para generar una cantidad de calor apreciable. En caso de modelarse el tratamiento termomecánico de austemperizado, en el cual se realiza una gran deformación plástica al material, esta interacción tendría que ser considerada.

*Interacción 3:* el modelo metalúrgico recibe información de la evolución de la temperatura en los distintos puntos de la pieza. Esta interacción es muy importante ya que las transformaciones modeladas son térmicamente activadas, es decir que su inicio depende del valor de la temperatura. Además, los modelos de cambio de fase dependen de variables tales como el coeficiente de difusión de carbono, las concentraciones de carbono en las fases, las densidades de las fases, entre otras, las cuales son fuertemente dependientes de la temperatura.

*Interacción 4:* a través de esta interacción el modelo térmico recibe información de la evolución de las fases durante todo el tratamiento térmico. De esta manera, el modelo térmico tiene en cuenta la absorción o generación del calor latente ocasionadas por

las transformaciones de fase endotérmicas o exotérmicas, respectivamente, hecho que cambia la historia térmica del material. Esta interacción es considerada en el modelo propuesto porque las transformaciones modeladas poseen calores latentes elevados.

*Interacción 5:* por medio de esta interacción el modelo mecánico recibe información de la evolución de las fases, pudiendo computarse así las deformaciones (contracción o dilatación) y las tensiones generadas por los cambios de fases. Esta interacción se tiene en cuenta porque el modelo predice el cambio de forma de la pieza al final del tratamiento térmico, al cual contribuye de manera importante la variación de la densidad del material que ocurre como consecuencia de los cambios de fase.

*Interacción 6:* mediante esta interacción el modelo metalúrgico recibe información de las deformaciones y tensiones computadas con el modelo mecánico. De esta forma, es posible considerar el efecto de las mismas en las transformaciones de fase. Experimentalmente se ha observado que las transformaciones ausferrítica y martensítica pueden ser inducidas por medio de deformaciones plásticas del material [Achary and Venugopalan, 2000, Garín and Mannheim, 2003, Nofal et al., 2007, Guzmán et al., 2013]. Esta interacción no es considerada en esta tesis porque el tratamiento modelado es solamente térmico, y las deformaciones plásticas en él generadas no son lo suficientemente importantes como para modificar el desarrollo de las transformaciones de fase.

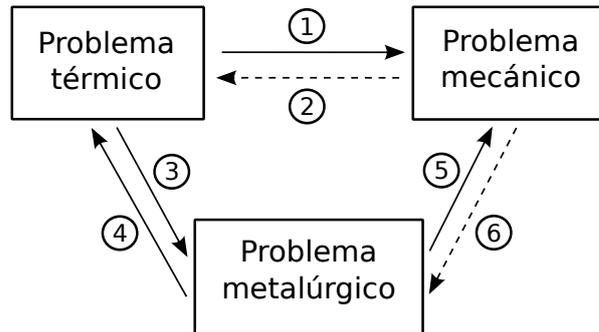


Figura 4.2: Interacciones entre los problemas térmico, mecánico y metalúrgico. Las flechas con líneas continuas representan a las interacciones consideradas en esta tesis, mientras que las flechas con líneas de trazos representan a las no consideradas.

### 4.3. Modelo termomecánico

A continuación se presenta la formulación del modelo termomecánico utilizado en esta tesis. Primero se describen brevemente las ecuaciones de continuidad, de movimiento y de balance de energía; luego se detalla el modelo constitutivo, señalando la contribución al mismo que se hace en este trabajo. La resolución de esta formulación se realiza en forma numérica a través de una discretización espacio-temporal llevada

a cabo en el contexto de los métodos de elementos finitos y diferencias finitas, respectivamente.

### Formulación termomecánica

La formulación termomecánica propone que las ecuaciones de gobierno local que describen la evolución de un proceso cuasi-estacionario son la ecuación de la continuidad (4.1), la ecuación del movimiento (4.2) y la ecuación de balance de energía (4.3), escritas en descripción Lagrangiana. Estas ecuaciones son válidas en  $\Omega \times \mathcal{Y}$ , donde  $\Omega$  es la configuración espacial del cuerpo (dominio abierto y acotado) y  $\mathcal{Y}$  es el intervalo del tiempo de análisis, con el tiempo  $t \in \mathcal{Y}$  [Celentano, 2001, Celentano, 2010].

$$\rho J = \rho_o \quad (4.1)$$

$$\nabla \boldsymbol{\sigma} + \rho \mathbf{b}_f = 0 \quad (4.2)$$

$$\rho c \dot{T} = \nabla \cdot (\mathbf{k} \nabla T) + \dot{Q} \quad (4.3)$$

donde  $\rho$  es la densidad,  $J$  es el determinante del tensor gradiente de deformación  $\mathbf{F}$ ,  $\boldsymbol{\sigma}$  es el tensor de tensiones de Cauchy,  $\mathbf{b}_f$  es el vector de fuerzas específicas de cuerpo,  $c$  es la capacidad calorífica específica tangente,  $Q$  es el calor latente generado por el cambio de fase,  $\mathbf{k}$  es el tensor isótropo de conductividad térmica definido como  $\mathbf{k} = k \mathbf{1}$ , siendo  $k$  el coeficiente de conductividad térmica y  $\mathbf{1}$  el tensor unitario de segundo orden, y  $T$  es la temperatura. En las ecuaciones  $\nabla$  es el operador gradiente, el punto arriba de una variable indica su derivada respecto del tiempo y el subíndice  $o$  aplicado a una variable indica su valor para el estado de configuración inicial  $\Omega_o$ . Todos los parámetros descriptos dependen de la temperatura.

El tensor  $\boldsymbol{\sigma}$  está definido por el modelo constitutivo utilizado para representar la fundición de hierro nodular, el cual se presenta en el apartado siguiente.

La tasa de generación de calor debido al cambio de fase es calculada utilizando la siguiente ecuación:

$$\dot{Q} = \rho (L_{\alpha \rightarrow \gamma} \dot{f}_{\gamma_s} + L_{p \rightarrow \gamma} \dot{f}_{\gamma_m} + L_{\gamma \rightarrow \alpha} \dot{f}_{\alpha_p}) \quad (4.4)$$

donde  $L_{\alpha \rightarrow \gamma}$ ,  $L_{p \rightarrow \gamma}$  y  $L_{\gamma \rightarrow \alpha}$  son los calores latentes específicos de las transformaciones eutectoide inversa estable, eutectoide inversa metaestable y ausferrítica, respectivamente, y  $f_{\gamma_s}$ ,  $f_{\gamma_m}$  y  $f_{\alpha_p}$  son las fracciones en volumen de la austenita estable y metaestable y de las subunidades de ferrita, respectivamente.

La transferencia de calor por convección-radiación a través de la intercara pieza-aire se modela utilizando la ley constitutiva secante de Newton, válida en  $\Gamma_q \times \mathcal{Y}$ , donde  $\Gamma_q$  es el contorno de  $\Omega$  en donde está prescrito el vector flujo de calor:

$$q_{conv} = -h(T - T_{env}) \quad (4.5)$$

donde  $q_{conv}$  es el flujo de calor normal a la intercara,  $h$  es el coeficiente de transferencia de calor por convección-radiación asociado a la intercara y  $T_{env}$  es la temperatura del medio que rodea a la pieza. El coeficiente  $h$  se asume dependiente sólo de la temperatura  $T$ .

### Modelo constitutivo elastoplástico

La ley de tensión-deformación y las ecuaciones de la evolución plástica del material están definidas, en esta tesis, en el contexto de la teoría de la plasticidad incremental (independiente de la evolución temporal de las variables plásticas). Este marco teórico fue elegido para la descripción constitutiva de la fundición de hierro nodular, debido a que en el modelado del proceso de solidificación de este material realizado por Celentano [Celentano, 2001] se obtuvieron respuestas similares considerando los comportamientos plástico y visco-plástico.

La relación entre la tensión  $\boldsymbol{\sigma}$  y la deformación total  $\mathbf{e}$  está dada por la ley constitutiva termoelastoplástica secante propuesta en esta tesis, válida en  $\Omega \times \mathcal{T}$ :

$$\boldsymbol{\sigma} = \mathbf{C} : (\mathbf{e} - \mathbf{e}^p - \mathbf{e}^v) \quad (4.6)$$

donde  $\mathbf{C}$  es el tensor constitutivo isótropo,  $\mathbf{e} = 1/2(\mathbf{1} - \mathbf{F}^{-T}\mathbf{F}^{-1})$  es el tensor de deformación de Almansi,  $\mathbf{e}^p$  es el tensor de deformación plástica de Almansi y  $\mathbf{e}^v$  es el tensor de deformación de Almansi asociado a la contracción o expansión volumétrica del material debida a los cambios de temperatura y de fase.

La evolución de  $\mathbf{e}^p$  está dada por:

$$L_v(\mathbf{e}^p) = \dot{\lambda}(\partial F/\partial \boldsymbol{\sigma}) \quad (4.7)$$

donde  $L_v$  es la derivada de Lie,  $\dot{\lambda}$  es el parámetro de consistencia plástica que se calcula utilizando los conceptos clásicos de la teoría de plasticidad y  $F = F(\boldsymbol{\sigma}, \bar{e}^p, T)$  es la función de fluencia que gobierna el comportamiento plástico del sólido, de tal manera que no ocurren evoluciones plásticas cuando  $F < 0$ .

Se adopta la función de fluencia de von Mises, la cual es dependiente de la temperatura:

$$F = (3J_2)^{1/2} - C_y \quad (4.8)$$

donde  $J_2$  es el segundo invariante de la parte desviatoria de  $\boldsymbol{\sigma}$ ;  $\sigma_{eq} = (3J_2)^{1/2}$  es la tensión equivalente o de von Mises y  $C_y$  es la función de endurecimiento total definida como:

$$C_y = C_{y_o} + C_h \quad (4.9)$$

donde  $C_{y_o}$  es la tensión de fluencia dependiente de la temperatura, la cual define el límite elástico inicial del material y  $C_h$  es la función de endurecimiento plástico isotrópico. En general, la tensión de fluencia disminuye con la temperatura. De esta forma se tiene en

### 4.3. Modelo termomecánico

cuenta el ablandamiento que sufre la fundición de hierro nodular cuando es calentada durante el tratamiento térmico.

La función de endurecimiento depende de la deformación plástica efectiva  $\bar{\epsilon}^p$ . De esta manera se tiene en cuenta el efecto de endurecimiento isotrópico por deformación:

$$C_h = A^p (\bar{\epsilon}^p)^{n^p} \quad (4.10)$$

donde

$$\dot{\bar{\epsilon}}^p = -\dot{\lambda}(\partial F / \partial C_h) \quad (4.11)$$

en la ecuación 4.10  $A^p$  es el índice de endurecimiento y  $n^p$  es el exponente de endurecimiento por deformación.

El tensor de deformación  $\mathbf{e}^v$  está dado por:

$$\mathbf{e}^v = \frac{1}{2} \left[ 1 - (1 - a_v)^{2/3} \right] \mathbf{1} \quad (4.12)$$

donde  $a_v$  es la deformación volumétrica secante, la cual tiene en cuenta la variación de volumen por los cambios de temperatura y de fase.

Para calcular la deformación en la escala macroscópica, se utiliza el modelo propuesto por Christien *et al.* [Christien et al., 2013], el cual cuantifica la deformación  $a_v$  en función del cambio de la densidad de la microestructura:

$$a_v = \frac{\rho_o^{mic}}{\rho^{mic}} - 1 \quad (4.13)$$

donde  $\rho_o^{mic}$  y  $\rho^{mic}$  son las densidades macroscópica de la microestructura al comienzo del tratamiento térmico y para un tiempo  $t$ , respectivamente.

Las densidades macroscópicas se definen utilizando la regla de las mezclas, lo cual es equivalente a plantear la conservación de la masa  $m_t = \sum_{i=1}^n (m_i)$ :

$$\rho_o^{mic} = f_{Gr_o} \rho_{Gr_o} + f_{\alpha_s o} \rho_{\alpha_o} + f_{p_o} \rho_{p_o} \quad (4.14)$$

$$\begin{aligned} \rho^{mic} = & f_{Gr} \rho_{Gr} + (f_{\alpha_s} + f_{\alpha_p}) \rho_{\alpha} + f_p \rho_p + f_{m_b} \rho_{m_b} \\ & + f_{m_h} \rho_{m_h} + f_{\gamma_l} \rho_{\gamma_l} + f_{\gamma_b} \rho_{\gamma_b} + f_{\gamma_h} \rho_{\gamma_h} \end{aligned} \quad (4.15)$$

donde  $f_{Gr}$ ,  $f_{\alpha_s}$ ,  $f_{\alpha_p}$ ,  $f_p$ ,  $f_{m_b}$ ,  $f_{m_h}$ ,  $f_{\gamma_l}$ ,  $f_{\gamma_b}$  y  $f_{\gamma_h}$  son las fracciones en volumen de nódulos de grafito, ferrita estable, subunidades de ferrita, perlita, martensita de bloques y de halos, y austenita de láminas, de bloques y de halos, respectivamente. Además,  $\rho_{Gr}$ ,  $\rho_{\alpha}$ ,  $\rho_p$ ,  $\rho_{m_b}$ ,  $\rho_{m_h}$ ,  $\rho_{\gamma_l}$ ,  $\rho_{\gamma_b}$  y  $\rho_{\gamma_h}$  son las densidades de grafito, ferrita, perlita, martensita de bloques y de halos, y austenita de láminas, de bloques y de halos, respectivamente. Las densidades de las fases se calculan con las ecuaciones que se encuentran en el Apéndice A. Las fracciones de las fases son calculadas utilizando el modelo metalúrgico que se encuentra en la siguiente sección.

## 4.4. Modelo metalúrgico

El modelo metalúrgico es el que permite simular las transformaciones de fase que experimenta el material en el tratamiento de austemperizado *de tres pasos*, desde la microestructura inicial, formada por nódulos de grafito inmersos en una matriz ferrítica, ferrítica-perlítica o perlítica, hasta la microestructura final. El proceso completo consiste en sucesivas transformaciones, cada una de ellas dependiente de los resultados de las anteriores. Transformar la microestructura inicial para así obtener otra compuesta por nódulos de grafito y una matriz ausferrítica es el principal objetivo del tratamiento térmico de austemperizado.

En el modelo metalúrgico propuesto se pueden identificar tres aspectos importantes: (a) los modelos de cambio de fase, (b) la interacción entre modelos de cambio de fase y (c) las condiciones bajo las cuales las transformaciones ocurren.

### Modelado de la evolución de las fases

Por medio de los modelos de cambio de fase se predice la evolución de las fases de cada una de las transformaciones. Cada modelo de cambio de fase, que compone lo que en este trabajo se llama el modelo metalúrgico, está planteado en la escala microscópica; de esta manera, la microestructura del material es descrita geoméricamente mediante elementos de volumen representativo, en los cuales la temperatura es asumida uniforme. Un elemento de estas características permite predecir la evolución de las fases analizando sólo una pequeña región de la microestructura, de tamaño suficiente para contener sus características distintivas tales como: a) el tipo de fases presentes, b) la forma y el tamaño de las fases y c) la distribución de las fases en la microestructura. El modelo metalúrgico de esta tesis considera las siguientes transformaciones y procesos:

- Transformación eutectoide inversa: mediante la cual la matriz inicial del material se transforma en otra completamente austenítica.
- Homogeneización de la concentración de carbono en la austenita: una vez que la matriz es completamente austenítica, su concentración de carbono alcanza un valor apropiado a través de este proceso.
- Transformación ausferrítica: por medio de esta transformación se obtiene una matriz ausferrítica a partir de la austenítica.
- Transformación martensítica: mediante la cual la austenita se transforma en martensita cuando el material es enfriado hasta la temperatura ambiente.

La transformación eutectoide, a través de la cual la austenita se transforma en ferrita y perlita, no es considerada por el modelo metalúrgico propuesto, asumiendo así que la velocidad de enfriamiento en cualquiera de los puntos de la pieza, cuando ésta es enfriada desde la temperatura de austenizado hasta la temperatura de austemperizado, es mayor que la crítica.

#### 4.4. Modelo metalúrgico

Para cada una de las transformaciones mencionadas se propone un nuevo modelo de cambio de fase, para así poder satisfacer las necesidades detectadas en la revisión bibliográfica y señaladas al final del Capítulo 3. Estos nuevos modelos se presentan en el Capítulo 5.

Las transformaciones modeladas ocurren cuando la temperatura, el tipo de fases existentes y la velocidad de enfriamiento cumplen con determinadas condiciones. Estas condiciones tienen que ser tenidas en cuenta para obtener una buena representación de la evolución de las fases durante todo el tratamiento térmico. En la figura 4.3 se presenta el diagrama de flujo del modelo metalúrgico propuesto, en el cual se observan las condiciones que se deben cumplir para que los distintos modelos de cambio de fase sean utilizados. En dicha figura  $TEI_s$ ,  $TEI_m$ ,  $TA$  y  $TM$  indican el desarrollo de las transformaciones eutectoide inversa estable, eutectoide inversa metaestable, ausferrítica y martensítica, respectivamente; mientras que  $HA$  indica el desarrollo de la homogeneización de la concentración de carbono en la austenita. Las temperaturas  $T_{EI_sS}$ ,  $T_{EI_mS}$ ,  $T_{AS}$  y  $T_{MS}$  son las de comienzo de las transformaciones eutectoide inversa estable, eutectoide inversa metaestable, ausferrítica y martensítica, respectivamente.

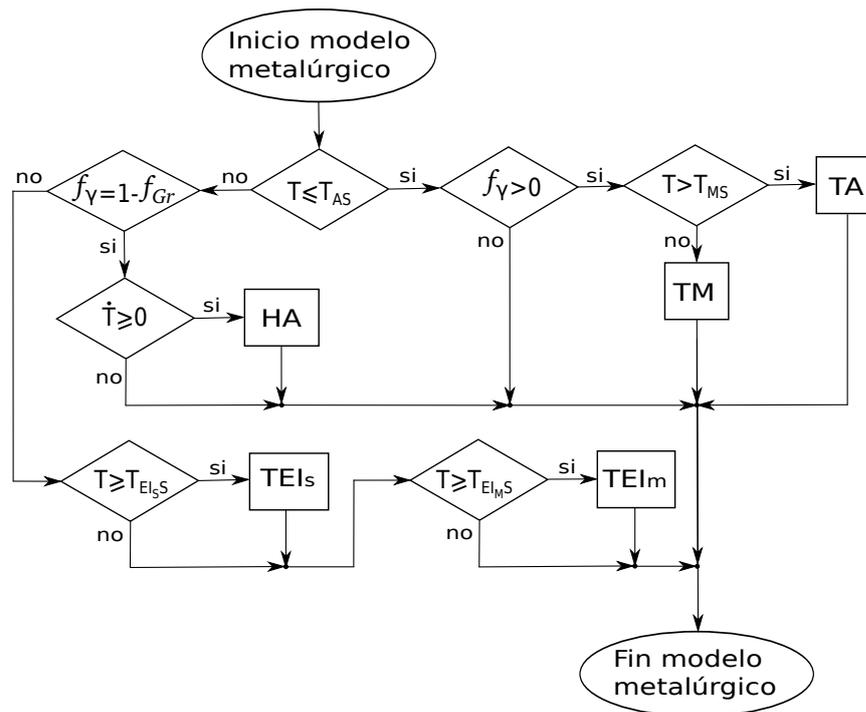


Figura 4.3: Diagrama de flujo del algoritmo del modelo metalúrgico.

Las variables definidas en el modelo metalúrgico pueden ser clasificadas en:

- Variables propias de cada modelo de cambio de fase.
- Variables asociadas a más de un modelo de cambio de fase.

## Capítulo 4. Características generales del modelo TMM

El último tipo de variables permiten el intercambio de información entre los modelos de cambio de fase. Estas variables son la fracción volumétrica, la concentración de carbono y la características geométricas de algunas de las fases presentes en el modelo metalúrgico, las cuales se describen a continuación:

*Radio del nódulo de grafito  $r_{Gr_i}$* : se calcula el valor inicial del radio de los nódulos de grafito utilizando datos de entrada. Los modelos de transformación eutectoide inversa y de homogeneización de carbono en la austenita establecen la evolución del radio en el *primer paso* del tratamiento térmico y determinan el valor de entrada para los modelos de la transformación ausferrítica y martensítica.

*Concentración de carbono en la austenita  $c_{\gamma_i}$* : es calculada por el modelo de homogeneización de la austenita. Luego es utilizada para definir la concentración de carbono en el halo de austenita ( $c_{\gamma_{h_i}} = c_{\gamma_i}$ ) en los modelos de transformación ausferrítica y martensítica.

*Concentración de carbono en los bloques de austenita  $c_{\gamma_b_i}$* : es calculada en la transformación ausferrítica. Luego es utilizada en la transformación martensítica para definir la concentración promedio de carbono en los bloques de austenita.

*Fracción volumétrica de nódulos de grafito  $f_{Gr}$* : constituye un dato de entrada del modelo metalúrgico. Su evolución es calculada por el modelo de transformación eutectoide inversa y por el de homogeneización de carbono en la austenita.

*Fracción volumétrica de austenita  $f_{\gamma}$* : es calculada por todos los modelos de cambio de fase presentados.

*Fracciones volumétricas de austenita de bloques ( $f_{\gamma_b}$ ) y de halos ( $f_{\gamma_h}$ )*: son calculadas en el modelo de transformación ausferrítica y recibida como dato y recalculada en el modelo de la transformación martensítica.

### Implementación del modelo metalúrgico en el programa de elementos finitos

Las ecuaciones diferenciales que modelan el crecimiento de las fases son resueltas numéricamente usando el método de Euler explícito [Chapra and Canale, 2010]. Todas las variables del modelo metalúrgico son actualizadas en cada uno de los pasos de tiempo.

El modelo metalúrgico es implementado en el programa de elementos finitos académico mediante subrutinas escritas en lenguaje Fortran. El modelo implementado toma y devuelve información en los puntos de integración del programa. De esta manera el modelo metalúrgico recibe información de la escala macroscópica y devuelve información de la escala microscópica en dichos puntos, como se observa en la figura 4.4.

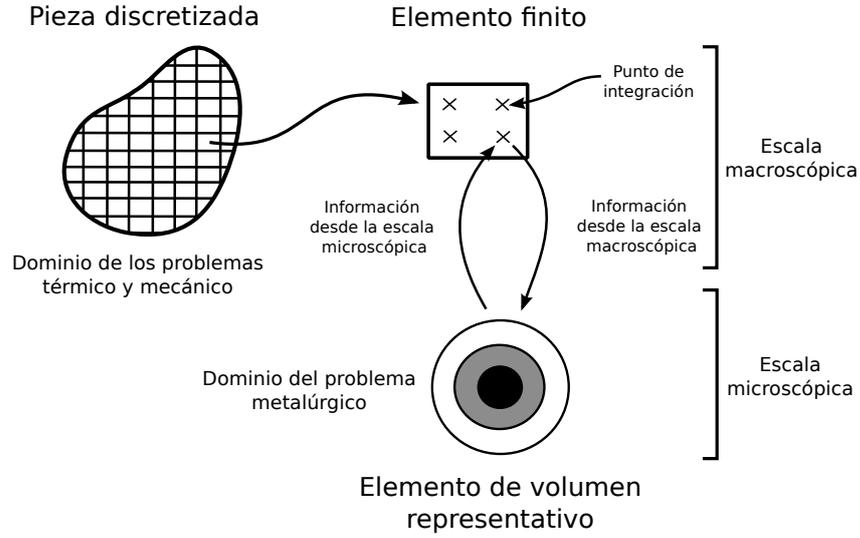


Figura 4.4: Esquema de intercambio de información entre los dominios de la escala macroscópica y microscópica en el modelo termomecánico-metalúrgico.

## 4.5. Estrategia de solución numérica

El sistema de ecuaciones no lineales del problema termomecánico-metalúrgico se resuelve empleando un esquema iterativo-incremental, porque el residuo es diferenciable. El sistema iterativo-incremental es el siguiente:

$$\begin{bmatrix} t+\Delta t \mathbf{J}_{UU}^{j-1} & t+\Delta t \mathbf{J}_{UT}^{j-1} \\ t+\Delta t \mathbf{J}_{TU}^{j-1} & t+\Delta t \mathbf{J}_{TT}^{j-1} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \Delta \mathbf{U}^j \\ \Delta \mathbf{T}^j \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} t+\Delta t \mathbf{R}_U^{j-1} \\ t+\Delta t \mathbf{R}_T^{j-1} \end{bmatrix} \quad (4.16)$$

donde  $\Delta \mathbf{U}$  es el vector de incremento de desplazamientos nodales,  $\Delta \mathbf{T}$  es el vector de incremento de temperatura nodales,  $\mathbf{R}_U$  es el vector de residuos del problema mecánico,  $\mathbf{R}_T$  es el vector de residuos del problema térmico, los elementos de la matriz  $\mathbf{J}$  son denominados subelementos de la matriz Jacobiana y  $j$  es el número de iteración.

Los vectores de desplazamientos nodales  $\mathbf{U}$  y de temperatura nodales  $\mathbf{T}$ , y las submatrices Jacobianas tangentes para la iteración  $j$ -ésima están definidos de la siguiente manera:

$${}^{t+\Delta t} \mathbf{U}^j = {}^{t+\Delta t} \mathbf{U}^{j-1} + \Delta \mathbf{U}^j \quad (4.17)$$

$${}^{t+\Delta t} \mathbf{T}^j = {}^{t+\Delta t} \mathbf{T}^{j-1} + \Delta \mathbf{T}^j \quad (4.18)$$

$${}^{t+\Delta t} \mathbf{J}_{UU}^j = - \left. \frac{\partial {}^{t+\Delta t} \mathbf{R}_U}{\partial \mathbf{U}} \right|^j = {}^{t+\Delta t} \mathbf{K}_U^j \quad (4.19)$$

$${}^{t+\Delta t}\mathbf{J}_{UT}^j = -\left.\frac{\partial {}^{t+\Delta t}\mathbf{R}_U}{\partial \mathbf{T}}\right|^j = {}^{t+\Delta t}\mathbf{P}^j \quad (4.20)$$

$${}^{t+\Delta t}\mathbf{J}_{TU}^j = -\left.\frac{\partial {}^{t+\Delta t}\mathbf{R}_T}{\partial \mathbf{U}}\right|^j = 0 \quad (4.21)$$

$${}^{t+\Delta t}\mathbf{J}_{TT}^j = -\left.\frac{\partial {}^{t+\Delta t}\mathbf{R}_T}{\partial \mathbf{T}}\right|^j = {}^{t+\Delta t}\mathbf{K}^j + \frac{1}{\Delta t} [{}^{t+\Delta t}\mathbf{C}^j + {}^{t+\Delta t}\mathbf{C}_{pc}^j] \quad (4.22)$$

donde  $\mathbf{K}_U$  es la matriz de rigidez (simétrica),  $\mathbf{P}$  es la matriz de acoplamiento debido a los efectos térmicos en las leyes constitutivas (no cuadrada),  $\mathbf{K}$  es la matriz de conductividad (simétrica),  $\mathbf{C}$  es la matriz de capacidad (simétrica) y  $\mathbf{C}_{pc}$  es la matriz de cambio de fase (simétrica).

Los valores iniciales de los vectores de desplazamientos nodales y de temperatura nodales (para  $j = 1$ ) se definen como:

$${}^{t+\Delta t}\mathbf{U}^o = {}^t\mathbf{U} \quad (4.23)$$

$${}^{t+\Delta t}\mathbf{T}^o = {}^t\mathbf{T} \quad (4.24)$$

siendo  ${}^t\mathbf{U}$  y  ${}^t\mathbf{T}$  los valores convergidos de los mencionados vectores para el tiempo  $t$ .

Los acoplamientos entre los problemas térmico, mecánico y metalúrgico, en función de las interacciones consideradas para modelar el tratamiento térmico de austemperizado, son los siguientes:

- Térmico-Mecánico: acoplamiento unidireccional. El problema mecánico recibe los valores convergidos de la temperatura.
- Metalúrgico-Mecánico: acoplamiento unidireccional. El problema mecánico recibe los valores convergidos de las fracciones volumétricas y de las concentraciones de carbono de las fases.
- Térmico-Metalúrgico: acoplamiento bidireccional. Hay intercambio de información entre ambos problemas, modificándose el resultado de cada uno de ellos mientras el problema térmico no se encuentre en convergencia.

La solución numérica del problema para un tiempo  $t + \Delta t$  se obtiene mediante el denominado esquema alternado, en el cual cada problema se resuelve por separado teniendo en cuenta las interacciones entre ellos. En la figura 4.5 se encuentra el diagrama de flujo de dicha solución numérica. La solución de  $\Delta T$  se calcula en conjunto con la solución del problema metalúrgico, debido al acoplamiento bidireccional. El algoritmo itera hasta que el problema térmico converja. El criterio de convergencia utilizado es el siguiente:

4.5. Estrategia de solución numérica

$$EcT = \frac{\|^{t+\Delta t}\mathbf{R}_T^{jT}\|_2}{\|^{t+\Delta t}\mathbf{K}_T^{jT} \ ^{t+\Delta t}\mathbf{T}^{jT}\|_2} < e_{R_T} \quad (4.25)$$

donde  $\|\cdot\|_2$  es la norma vectorial del espacio  $L_2$ ,  $e_{R_T}$  es la medida del residuo desbalanceado admisible para el problema térmico y  $jT$  es el número de iteración para el problema térmico.

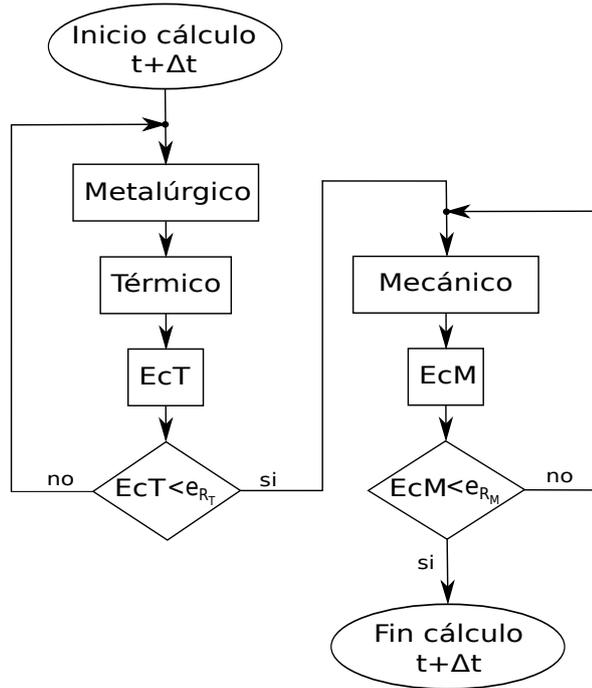


Figura 4.5: Diagrama de flujo del algoritmo para resolver el problema termomecánico-metalúrgico para un tiempo  $t + \Delta t$ .

Una vez calculada la solución de los problemas anteriores, estas se pasan al problema mecánico para que pueda ser resuelto. El algoritmo itera hasta que el problema mecánico converja. El criterio de convergencia es el siguiente:

$$EcM = \frac{\|^{t+\Delta t}\mathbf{R}_U^{jU}\|_2}{\|^{t+\Delta t}\mathbf{F}_U^{jU}\|_2} < e_{R_U} \quad (4.26)$$

donde  $\mathbf{F}_U$  es el vector de fuerzas exteriores,  $e_{R_U}$  es la medida del residuo desbalanceado admisible para el problema mecánico y  $jU$  es el número de iteración para el problema mecánico.

Cuando el cálculo del problema mecánico converge, se completó el cálculo del problema termomecánico-metalúrgico para el tiempo  $t + \Delta t$ , porque el acoplamiento del problema mecánico con el térmico y el metalúrgico es unidireccional.



# Capítulo 5

## Modelos de cambio de fase propuestos

### 5.1. Introducción

Para modelar la evolución de las fases durante el tratamiento térmico de austemperizado *de tres pasos* de una fundición de hierro nodular, se han desarrollado nuevos modelos de cambio de fase para cada una de las transformaciones consideradas en el modelo metalúrgico presentado en el Capítulo 4.

Cada uno de los modelos se ha planteado en la escala microscópica del material mediante elementos de volumen representativo, considerando de este modo distintos aspectos de la microestructura de la fundición, tales como la cantidad total y la distribución de tamaño de los nódulos de grafito, el espaciado interlaminar y el tamaño de los granos de perlita, el tamaño de las subunidades de ferrita, los sitios de nucleación de las nuevas fases y la interacción entre fases durante las transformaciones, entre otros. La naturaleza de estos modelos es determinística, motivo por el cual los sitios de nucleación y la orientación de las fases durante el crecimiento de las mismas no se definen aleatoriamente.

A continuación se presentan los modelos de cambio de fase eutectoide inverso, de homogeneización de la concentración de carbono en la austenita y de las transformaciones ausferrítica y martensítica, cuyos desarrollos se considera el mayor aporte original de esta tesis.

### 5.2. Transformación eutectoide inversa

La transformación eutectoide inversa es modelada considerando tanto el cambio de fase estable (ferrita a austenita) como el metaestable (perlita a austenita) [Lacaze and Gerval, 1998, Carazo et al., 2012].

El modelo considera una microestructura inicial formada por nódulos de grafito, halos de ferrita y colonias de perlita, pudiendo ser todos ellos de diversos tamaños.

### 5.2.1. Transformación eutectoide inversa estable

El modelo de la transformación eutectoide inversa estable predice la evolución de las fracciones de grafito, de ferrita y de austenita estable, teniendo en cuenta la cantidad total y la distribución de tamaño de los nódulos de grafito, el tamaño de los halos de ferrita y la composición química de la aleación. El término austenita estable se utilizará en esta tesis para indicar que esta nueva fase se formó mediante la transformación eutectoide inversa estable.

La transformación comienza cuando en el calentamiento la temperatura  $T$  del material alcanza un valor mayor o igual al de la temperatura de comienzo de la transformación eutectoide inversa estable  $T_{EISS}$ . De acuerdo a lo propuesto por Ghergu *et al.* [Ghergu et al., 2012]  $T_{EISS} = T_{\alpha}^0$ , siendo  $T_{\alpha}^0$  la mayor temperatura del campo trifásico del sistema estable  $Fe-C-Si$ , ver figura 2.10, la cual es calculada con la ecuación A.19 que se encuentra en el Apéndice A.

#### Elemento de volumen representativo

Los nódulos de grafito están clasificados en familias de acuerdo a sus tamaños. La familia  $i$  está formada por todos los nódulos de grafito de radio  $r_{Gr_i}$ . Para cada familia de nódulos de grafito se propone usar un elemento de volumen representativo esférico  $EV R_{s_i}$ , ver figura 5.1, el cual está formado por un nódulo de grafito rodeado por un halo de ferrita, tal como lo han considerado Batra *et al.* [Batra et al., 2005]. El radio inicial de los nódulos de grafito es calculado de la siguiente manera:

$$r_{Gr_{i_0}} = \left( \frac{3f_{set_i}f_{Gr_0}}{4\pi N_{set_i}} \right)^{1/3} \quad (5.1)$$

donde  $f_{set_i}$  es la fracción inicial de nódulos de grafito respecto del volumen total de nódulos de grafito y  $N_{set_i}$  es el número de nódulos de grafito por unidad de volumen, ambos pertenecientes a la familia  $i$ . Además,  $f_{Gr}$  es la fracción en volumen de grafito. El subíndice 0 indica que los valores de las variables corresponden al estado inicial.

El radio del  $EV R_{s_i}$  es calculado como:

$$r_{\alpha_i} = r_{Gr_{i_0}} \left( 1 + \frac{f_{\alpha_{s_0}}}{f_{Gr_0}} \right)^{1/3} \quad (5.2)$$

donde  $f_{\alpha_s}$  es la fracción en volumen de ferrita.

La nucleación de la austenita ocurre en la intercara grafito-ferrita [Batra et al., 2005]. Se considera una nucleación instantánea de un halo de austenita, cuyo radio exterior es un 1% mayor que el radio del grafito. Al tratarse de una transformación reconstructiva, el mecanismo de crecimiento es gobernado por la difusión del carbono de largo alcance desde el grafito hacia la ferrita, a través del halo de austenita.

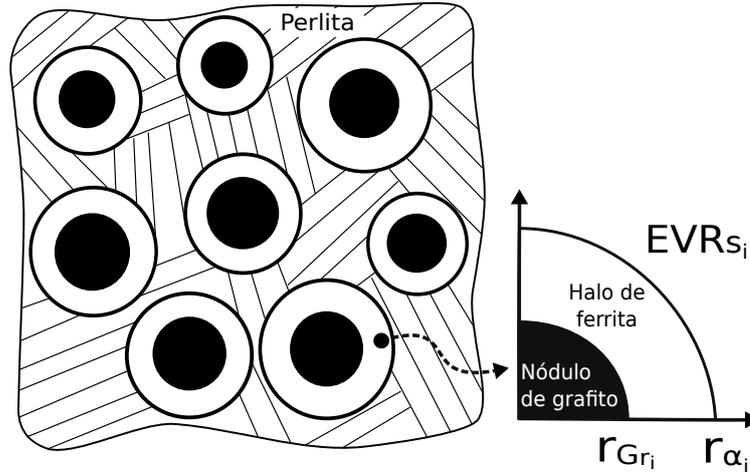


Figura 5.1: Elemento de volumen representativo  $EVR_{s_i}$  utilizado para modelar la transformación eutectoide inversa estable.

### Fracciones de fase

Teniendo en cuenta las familias de los nódulos de grafito, las fracciones en volumen de grafito, de ferrita y de austenita estable para un tiempo  $t$  son:

$$f_{Gr} = \frac{4\pi}{3} \sum_{i=1}^{nfamg} N_{set_i} r_{Gr_i}^3 \quad (5.3)$$

$$f_{\gamma_s} = \frac{4\pi}{3} \sum_{i=1}^{nfamg} N_{set_i} \left( r_{\gamma_i}^3 - r_{Gr_i}^3 \right) \quad (5.4)$$

$$f_{\alpha_s} = \frac{4\pi}{3} \sum_{i=1}^{nfamg} N_{set_i} \left( r_{\alpha_i}^3 - r_{\gamma_i}^3 \right) \quad (5.5)$$

donde  $r_{\gamma_i}$  es el radio del halo de austenita estable (ver figura 5.2). El número total de familias se define como  $nfamg$ .

### Evolución de las fracciones de fase

Las velocidades de crecimiento de los radios de grafito y de la austenita estable, para cada familia de nódulos de grafito, son computadas a través del balance de masa de carbono en las intercaras móviles grafito-austenita y austenita-ferrita, considerando difusión del carbono en régimen estacionario y conservación de la masa de carbono en el  $EVR_{s_i}$ . El perfil de concentración de carbono se ilustra en la figura 5.2.

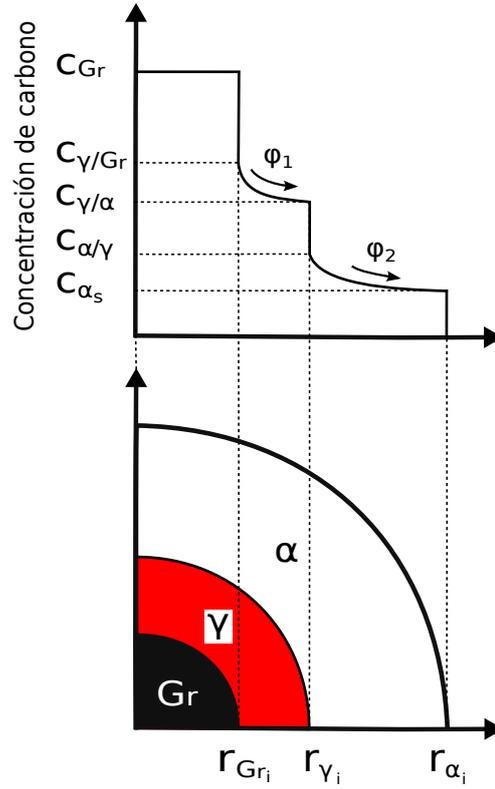


Figura 5.2: Perfil de la concentración de carbono en el  $EVR_{s_i}$ .

La ecuación de balance de masa de carbono en la intercara móvil grafito-austenita es:

$$D_\gamma \rho_\gamma \frac{dc_\gamma}{dr} \Big|_{r_{Gr_i}^+} = \frac{dr_{Gr_i}}{dt} (c_{Gr} \rho_{Gr} - c_{\gamma/Gr} \rho_\gamma) \quad (5.6)$$

donde  $D_\gamma$  es el coeficiente de difusión de carbono en la austenita,  $c_{\gamma/Gr}$  es la concentración de carbono de equilibrio de la austenita en la intercara austenita-grafito y  $c_{Gr}$  es la concentración de carbono del grafito. Además,  $\rho_{Gr}$  y  $\rho_\gamma$  son las densidades del grafito y de la austenita, respectivamente.

Despejando de la ecuación anterior la velocidad de la intercara, se obtiene:

$$\frac{dr_{Gr_i}}{dt} = \frac{D_\gamma \rho_\gamma}{(c_{Gr} \rho_{Gr} - c_{\gamma/Gr} \rho_\gamma)} \frac{dc_\gamma}{dr} \Big|_{r_{Gr_i}^+} \quad (5.7)$$

Para calcular la derivada del perfil de la concentración de carbono en la austenita, en la intercara grafito-austenita, primero se define dicho perfil a través de la segunda ley de Fick (en coordenadas radiales) considerando difusión de carbono en régimen estacionario:

## 5.2. Transformación eutectoide inversa

$$c_\gamma = \frac{a}{r} + b \quad (5.8)$$

donde  $a$  y  $b$  son constantes a determinar. Teniendo en cuenta las siguientes condiciones de borde  $c_\gamma|_{r=r_{Gr_i}} = c_{\gamma/Gr}$  y  $c_\gamma|_{r=r_{\gamma_i}} = c_{\gamma/\alpha}$ ,  $a$  y  $b$  resultan:

$$a = -\frac{r_{Gr_i}r_{\gamma_i}(c_{\gamma/\alpha} - c_{\gamma/Gr})}{r_{\gamma_i} - r_{Gr_i}} \quad (5.9)$$

$$b = c_{\gamma/Gr} + \frac{r_{\gamma_i}(c_{\gamma/\alpha} - c_{\gamma/Gr})}{r_{\gamma_i} - r_{Gr_i}} \quad (5.10)$$

Calculando la derivada de la ecuación 5.8 y evaluándola para  $r = r_{Gr_i}$  se obtiene:

$$\left. \frac{dc_\gamma}{dr} \right|_{r_{Gr_i}^+} = \frac{r_{\gamma_i}}{r_{Gr_i}} \frac{(C_{\gamma/\alpha} - C_{\gamma/Gr})}{(r_{\gamma_i} - r_{Gr_i})} \quad (5.11)$$

Reemplazando la ecuación anterior en la 5.7 se obtiene la velocidad de la intercara:

$$\frac{dr_{Gr_i}}{dt} = \frac{D_\gamma \rho_\gamma r_{\gamma_i}}{r_{Gr_i}(r_{\gamma_i} - r_{Gr_i})} \frac{(c_{\gamma/\alpha} - c_{\gamma/Gr})}{(c_{Gr} \rho_{Gr} - c_{\gamma/Gr} \rho_\gamma)} \quad (5.12)$$

La ecuación de balance de masa de carbono en la intercara móvil austenita-ferrita es:

$$D_\alpha \rho_\alpha \left. \frac{dc_\alpha}{dr} \right|_{r_{\gamma_i}^+} - D_\gamma \rho_\gamma \left. \frac{dc_\gamma}{dr} \right|_{r_{\gamma_i}^-} = \frac{dr_{\gamma_i}}{dt} (c_{\gamma/\alpha} \rho_\gamma - c_{\alpha/\gamma} \rho_\alpha) \quad (5.13)$$

donde  $D_\alpha$  y  $\rho_\alpha$  son el coeficiente de difusión de carbono en la ferrita y la densidad de la ferrita, respectivamente. Además,  $c_{\gamma/\alpha}$  es la concentración de carbono de equilibrio de la austenita en la intercara austenita-ferrita,  $c_{\alpha/\gamma}$  es la concentración de carbono de equilibrio de la ferrita en la intercara ferrita-austenita.

Despejando de la ecuación anterior la velocidad de la intercara se, obtiene:

$$\frac{dr_{\gamma_i}}{dt} = \frac{D_\alpha \rho_\alpha}{(c_{\gamma/\alpha} \rho_\gamma - c_{\alpha/\gamma} \rho_\alpha)} \left. \frac{dc_\alpha}{dr} \right|_{r_{\gamma_i}^+} - \frac{D_\gamma \rho_\gamma}{(c_{\gamma/\alpha} \rho_\gamma - c_{\alpha/\gamma} \rho_\alpha)} \left. \frac{dc_\gamma}{dr} \right|_{r_{\gamma_i}^-} \quad (5.14)$$

Para calcular la derivada del perfil de la concentración de carbono en la austenita, en la intercara austenita-ferrita, la derivada de la ecuación 5.8 es evaluada para  $r = r_{\gamma_i}$ :

$$\left. \frac{dc_\gamma}{dr} \right|_{r_{\gamma_i}^-} = \frac{r_{Gr_i}}{r_{\gamma_i}} \frac{(c_{\gamma/\alpha} - c_{\gamma/Gr})}{(r_{\gamma_i} - r_{Gr_i})} \quad (5.15)$$

Para calcular la derivada del perfil de la concentración de carbono en la ferrita, en la intercara austenita-ferrita, primero se define dicho perfil a través de la segunda

Capítulo 5. Modelos de cambio de fase propuestos

ley de Fick (en coordenadas radiales) considerando difusión de carbono en régimen estacionario:

$$c_\alpha = \frac{a}{r} + b \quad (5.16)$$

Aplicando las condiciones de bordes  $c_\alpha|_{r=r_{\gamma_i}} = c_{\alpha/\gamma}$  y  $c_\alpha|_{r=r_{\alpha_i}} = c_{\alpha_{s_i}}$ ,  $a$  y  $b$  resultan:

$$a = -\frac{r_{\gamma_i} r_{\alpha_i} (c_{\alpha_{s_i}} - c_{\alpha/\gamma})}{r_{\alpha_i} - r_{\gamma_i}} \quad (5.17)$$

$$b = c_{\alpha/\gamma} + \frac{r_{\alpha_i} (c_{\alpha_{s_i}} - c_{\alpha/\gamma})}{r_{\alpha_i} - r_{\gamma_i}} \quad (5.18)$$

Calculando la derivada de la ecuación 5.16 y evaluándola para  $r = r_{\gamma_i}$  se obtiene:

$$\left. \frac{dc_\alpha}{dr} \right|_{r_{\gamma_i}^+} = \frac{r_{\alpha_i} (c_{\alpha_{s_i}} - c_{\alpha/\gamma})}{r_{\gamma_i} (r_{\alpha_i} - r_{\gamma_i})} \quad (5.19)$$

Reemplazando las ecuaciones 5.15 y 5.19 en 5.14 se obtiene la velocidad de la intercara:

$$\begin{aligned} \frac{dr_{\gamma_i}}{dt} = & \frac{D_\alpha \rho_\alpha r_{\alpha_i}}{r_{\gamma_i} (r_{\alpha_i} - r_{\gamma_i})} \frac{(c_{\alpha_{s_i}} - c_{\alpha/\gamma})}{(c_{\gamma/\alpha} \rho_\gamma - c_{\alpha/\gamma} \rho_\alpha)} \\ & - \frac{D_\gamma \rho_\gamma r_{Gr_i}}{r_{\gamma_i} (r_{\gamma_i} - r_{Gr_i})} \frac{(c_{\gamma/\alpha} - c_{\gamma/Gr})}{(c_{\gamma/\alpha} \rho_\gamma - c_{\alpha/\gamma} \rho_\alpha)} \end{aligned} \quad (5.20)$$

donde  $c_{\alpha_{s_i}}$  es la concentración de carbono de la ferrita en  $r_{\alpha_i}$ .

La concentración de carbono en el grafito es  $c_{Gr} = 100\%$  peso. Las concentraciones  $c_{\gamma/\alpha}$ ,  $c_{\gamma/Gr}$  y  $c_{\alpha/\gamma}$  son calculadas con las ecuaciones A.11, A.15 y A.12, respectivamente. Las densidades  $\rho_{Gr}$ ,  $\rho_\gamma$  y  $\rho_\alpha$  son calculadas con las ecuaciones A.5, A.2 y A.1, respectivamente. Los coeficientes de difusión de carbono  $D_\alpha$  y  $D_\gamma$  son calculados con las ecuaciones A.17 y A.18, respectivamente. Todas estas ecuaciones se encuentran en el Apéndice A. Por último, la concentración  $c_{\alpha_{s_i}}$  es calculada considerando conservación de la masa de carbono en el  $EV R_{s_i}$  resultando la siguiente expresión:

$$c_{\alpha_{s_i}} = \frac{2\rho_{EV R_{s_i}} c_{EV R_{s_i}} - [f_{\alpha_i}^* \rho_\alpha c_{\alpha/\gamma} + f_{\gamma_i}^* \rho_\gamma (c_{\gamma/Gr} + c_{\gamma/\alpha}) + 2f_{Gr_i}^* \rho_{Gr} c_{Gr}]}{f_{\alpha_i}^* \rho_\alpha} \quad (5.21)$$

donde  $f_{Gr_i}^* = (r_{Gr_i}/r_{\alpha_i})^3$ ,  $f_{\alpha_i}^* = 1 - (r_{\gamma_i}/r_{\alpha_i})^3$  y  $f_{\gamma_i}^* = (r_{\gamma_i}^3 - r_{Gr_i}^3)/r_{\alpha_i}^3$  son las fracciones volumétricas de grafito, de ferrita y de austenita, respectivamente, normalizadas respecto del volumen del  $EV R_{s_i}$ . Además,  $\rho_{EV R_{s_i}}$  es la densidad resultante del  $EV R_{s_i}$  y  $c_{EV R_{s_i}} = (\rho_T c_T - f_{p_o} \rho_p c_p) / [(1 - f_{p_o}) \rho_{EV R_{s_i}}]$  siendo  $\rho_T$  y  $c_T$  la densidad total y la concentración de carbono total de la fundición de hierro nodular, respectivamente.

## 5.2. Transformación eutectoide inversa

Cuando las fracciones iniciales de grafito y de ferrita son elevadas, se producen contactos entre los halos vecinos de la austenita estable cuando éstos están creciendo. En la figura 5.3a se representa una microestructura inicial en la cual no van a ocurrir contactos y en la 5.3b una microestructura inicial en la cual van a ocurrir contactos entre los halos vecinos de austenita. En dicho caso el contacto comienza a existir cuando los radios exteriores de los halos sean iguales a los representados por las líneas de punto.

El contacto entre halos vecinos de austenita produce la disminución de la velocidad de crecimiento. Este fenómeno es considerado utilizando un coeficiente  $GI_{EI}$  que multiplica el lado derecho de la ecuación 5.20 cuando los halos de austenita comienzan a estar en contacto:

$$GI_{EI} = \left[ \frac{1 - (f_{Gr} + f_{\gamma_s})}{1 - f_{con_{EI}}} \right]^{2/3} \quad (5.22)$$

donde  $f_{con_{EI}}$  es la suma de las fracciones en volumen de grafito y austenita estable cuando los halos vecinos de austenita estable comienzan a estar en contacto. Al igual que en la referencia [Su et al., 1985], en este trabajo se considera  $f_{con_{EI}} = 0,5$ .

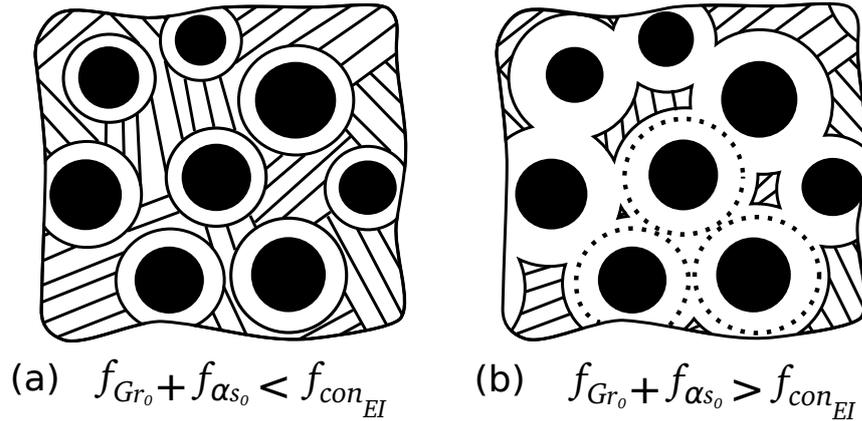


Figura 5.3: Microestructura inicial con una matriz ferrítica-perlítica en la cual (a) no van a ocurrir contactos y (b) si van a ocurrir contactos entre los halos vecinos de austenita durante la transformación eutectoide inversa estable.

### 5.2.2. Transformación eutectoide inversa metaestable

El modelo de transformación eutectoide inversa metaestable predice la evolución de las fracciones de perlita y de austenita metaestable, teniendo en cuenta el espaciado interlamilar de las colonias de perlita y la composición química de la aleación. El término austenita metaestable se utilizará en esta tesis para indicar que esta nueva fase se formó mediante la transformación eutectoide inversa metaestable.

La transformación comienza cuando en el calentamiento la temperatura  $T$  del material alcanza un valor mayor o igual al de la temperatura de comienzo de la

transformación eutectoide inversa metaestable  $T_{EIMS}$ . De acuerdo a lo propuesto por Ghergu *et al.* [Ghergu et al., 2012]  $T_{EIMS} = T_p$  si  $T_p > T_\alpha$ , o  $T_{EIMS} = T_\alpha$  si  $T_\alpha > T_p$ , siendo  $T_p$  la menor temperatura del campo trifásico del sistema metaestable  $Fe-C-Si$  y  $T_\alpha$  la menor temperatura del campo trifásico del sistema estable  $Fe-C-Si$ , ver figura 2.10, las cuales se calculan con las ecuaciones A.22 y A.20, respectivamente, que se encuentran en el Apéndice A.

### Elemento de volumen representativo

La velocidad de la transformación eutectoide inversa metaestable depende del espaciado interlaminar de las colonias de perlita. Las colonias de perlita son clasificadas en familias de acuerdo a su espaciado interlaminar. La familia  $j$  está formada por todas las colonias de perlita de espaciado interlaminar  $ips_j$ . Para cada familia de colonias de perlita de igual espaciado interlaminar, se propone usar un elemento de volumen representativo unidimensional  $EVR_{m_j}$ , ver figura 5.4, el cual está formado por medio espesor de lámina de ferrita y medio espesor de lámina de cementita, tal como lo han considerado en la referencia [Kapturkiewicz et al., 2005]. El largo del  $EVR_{m_j}$  es  $z_{\alpha_j} = ips_j/2$ .

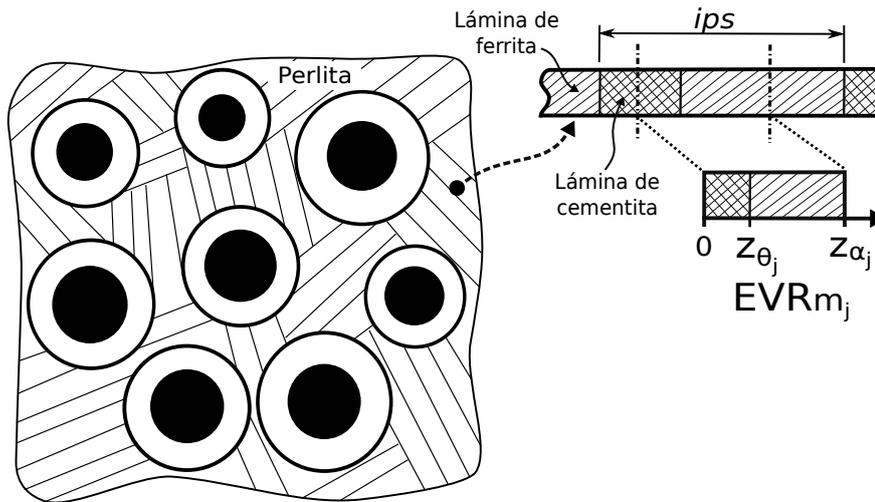


Figura 5.4: Elemento de volumen representativo  $EVR_{m_j}$  utilizado para modelar la transformación eutectoide inversa metaestable  $EVR_{m_j}$ .

La nucleación de la austenita metaestable ocurre en la intercara cementita-ferrita [Kapturkiewicz et al., 2005]. En este modelo se considera una nucleación instantánea de una lámina de austenita, cuyo espesor es igual al 1% del espesor de la lámina de cementita. Debido a que la transformación es del tipo reconstructiva, el mecanismo de crecimiento está gobernado por la difusión de carbono de largo alcance desde la cementita hacia la ferrita, a través de la lámina de austenita.

### Fracciones de fase

Las fracciones en volumen de perlita  $f_p$ , de austenita metaestable  $f_{\gamma_m}$  y de cementita  $f_\theta$  son evaluadas para un tiempo  $t$  teniendo en cuenta las familias de colonias de perlita:

$$f_p = \sum_{j=1}^{nfamc} f_{p_j} \left[ 1 - \frac{(z_{\gamma_j} - z_{\theta_j})}{z_{\alpha_j}} \right] \quad (5.23)$$

$$f_{\gamma_m} = \sum_{j=1}^{nfamc} f_{p_j} \frac{(z_{\gamma_j} - z_{\theta_j})}{z_{\alpha_j}} \quad (5.24)$$

$$f_\theta = \sum_{j=1}^{nfamc} f_{p_j} \frac{z_{\theta_j}}{z_{\alpha_j}} \quad (5.25)$$

donde  $z_{\theta_j}$  y  $z_{\gamma_j}$  son las coordenadas de las intercaras cementita-austenita y austenita-ferrita, respectivamente (ver figura 5.5). El número de familias de colonias de perlita es  $nfamc$ .

El valor inicial de  $z_{\theta_j}$  es calculado teniendo en cuenta la fracción de cementita  $f_{\theta/p}$ , relativa al volumen de perlita, utilizando la expresión siguiente:

$$z_{\theta_{j_0}} = z_{\alpha_j} f_{\theta/p} \quad (5.26)$$

donde

$$f_{\theta/p} = \frac{c_p \rho_p - c_{\alpha/\theta} \rho_\alpha}{c_\theta \rho_\theta - c_{\alpha/\theta} \rho_\alpha} \quad (5.27)$$

siendo  $\rho_\alpha$ ,  $\rho_p$  y  $\rho_\theta$  las densidades de la ferrita, de la perlita y de la cementita, respectivamente. Además,  $c_p$  es la concentración de carbono de la perlita,  $c_{\alpha/\theta}$  es la concentración de carbono de equilibrio de la ferrita en la intercara ferrita-cementita y  $c_\theta$  es la concentración de carbono de la cementita.

Los valores de  $c_{\alpha/\theta}$  y  $c_\theta$  son 0,03 %*peso* y 6,67 %*peso*, respectivamente [Carazo, 2012]. La concentración de carbono de la perlita es evaluada usando la ecuación  $c_p = c_{\gamma/\alpha}|_{T_p^0}$ , donde  $T_p^0$  es la mayor temperatura del campo trifásico del sistema metaestable  $Fe-C-Si$ , que es calculada con la ecuación A.21 que se encuentra en el Apéndice A.

### Evolución de las fracciones de fase

Las evoluciones de las fracciones de cementita, de austenita y de ferrita son evaluadas mediante el balance de masa de carbono en las intercaras móviles austenita-ferrita y cementita-austenita, considerando la difusión de carbono en régimen estacionario y la conservación de la masa de carbono en el  $EVR_{m_j}$ . El perfil de concentración de carbono se ilustra en la figura 5.5.

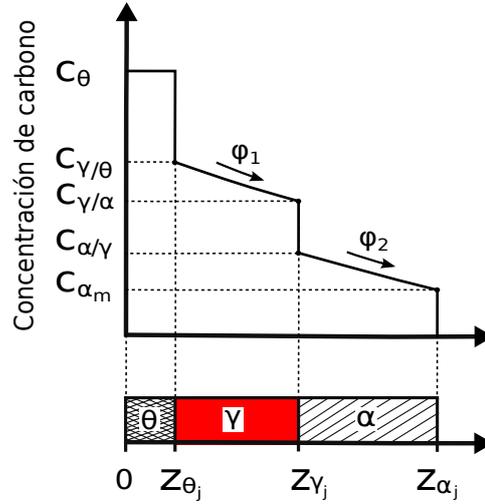


Figura 5.5: Perfil de la concentración de carbono en el  $EVR_{m_j}$ .

La ecuación de balance de masa de carbono en la intercara móvil cementita-austenita es:

$$D_{\gamma}\rho_{\gamma}\left.\frac{dc_{\gamma}}{dz}\right|_{z_{\theta_j}^+} = \frac{dz_{\theta_j}}{dt}(c_{\theta}\rho_{\theta} - c_{\gamma/\theta}\rho_{\gamma}) \quad (5.28)$$

donde  $c_{\gamma/\theta}$  es la concentración de equilibrio de carbono en la intercara austenita-cementita.

De la ecuación anterior se puede calcular la velocidad de crecimiento de la intercara:

$$\frac{dz_{\theta_j}}{dt} = \frac{D_{\gamma}\rho_{\gamma}}{(c_{\theta}\rho_{\theta} - c_{\gamma/\theta}\rho_{\gamma})}\left.\frac{dc_{\gamma}}{dz}\right|_{z_{\theta_j}^+} \quad (5.29)$$

Para determinar la derivada de la concentración de carbono en la austenita, en la intercara cementita-austenita, primero se define dicho perfil a través de la segunda ley de Fick (en coordenadas rectangulares) considerando difusión de carbono en régimen estacionario:

$$c_{\gamma} = a + b.z \quad (5.30)$$

donde  $a$  y  $b$  son constantes. Considerando las siguientes condiciones de bordes  $c_{\gamma}|_{z=z_{\theta_j}} = c_{\gamma/\theta}$  y  $c_{\gamma}|_{z=z_{\gamma_j}} = c_{\gamma/\alpha}$ ,  $a$  y  $b$  resultan:

$$a = c_{\gamma/\theta} - \frac{z_{\theta_j}}{(z_{\gamma_j} - z_{\theta_j})}(c_{\gamma/\alpha} - c_{\gamma/\theta}) \quad (5.31)$$

$$b = \frac{c_{\gamma/\alpha} - c_{\gamma/\theta}}{z_{\gamma_j} - z_{\theta_j}} \quad (5.32)$$

## 5.2. Transformación eutéctode inversa

Calculando la derivada de la ecuación 5.30 y evaluándola para  $z = z_{\theta_j}$  se obtiene:

$$\left. \frac{dc_\gamma}{dz} \right|_{z_{\theta_j}^+} = \frac{c_{\gamma/\alpha} - c_{\gamma/\theta}}{z_{\gamma_j} - z_{\theta_j}} \quad (5.33)$$

Reemplazando la ecuación anterior en la ecuación 5.29 se obtiene la velocidad de la intercara:

$$\frac{dz_{\theta_j}}{dt} = \frac{D_\gamma \rho_\gamma}{(z_{\gamma_j} - z_{\theta_j})} \frac{(c_{\gamma/\alpha} - c_{\gamma/\theta})}{(c_\theta \rho_\theta - c_{\gamma/\theta} \rho_\gamma)} \quad (5.34)$$

La ecuación de balance de masa de carbono en la intercara móvil austenita-ferrita es:

$$D_\alpha \rho_\alpha \left. \frac{dc_\alpha}{dz} \right|_{z_{\gamma_j}^-} - D_\gamma \rho_\gamma \left. \frac{dc_\gamma}{dz} \right|_{z_{\gamma_j}^+} = \frac{dz_{\gamma_j}}{dt} (c_{\gamma/\alpha} \rho_\gamma - c_{\alpha/\gamma} \rho_\alpha) \quad (5.35)$$

De la ecuación anterior la velocidad de la intercara resulta:

$$\frac{dz_{\gamma_j}}{dt} = \frac{D_\alpha \rho_\alpha \left. \frac{dc_\alpha}{dz} \right|_{z_{\gamma_j}^+} - D_\gamma \rho_\gamma \left. \frac{dc_\gamma}{dz} \right|_{z_{\gamma_j}^-}}{(c_{\gamma/\alpha} \rho_\gamma - c_{\alpha/\gamma} \rho_\alpha)} \quad (5.36)$$

Para calcular la derivada del perfil de la concentración de carbono en la austenita, en la intercara austenita-ferrita, la derivada de la ecuación 5.30 se evalúa para  $z = z_{\gamma_j}$  obteniéndose:

$$\left. \frac{dc_\gamma}{dz} \right|_{z_{\gamma_j}^-} = \frac{c_{\gamma/\alpha} - c_{\gamma/\theta}}{z_{\gamma_j} - z_{\theta_j}} \quad (5.37)$$

Para calcular la derivada de la concentración de carbono de la ferrita, en la intercara austenita-ferrita, primero se define dicho perfil a través de la segunda ley de Fick (en coordenadas rectangulares) considerando difusión de carbono en régimen estacionario:

$$c_\alpha = a + b.z \quad (5.38)$$

Aplicando las condiciones de borde  $c_\alpha|_{z=z_{\gamma_j}} = c_{\alpha/\gamma}$  y  $c_\alpha|_{z=z_{\alpha_j}} = c_{\alpha_{m_j}}$ ,  $a$  y  $b$  resultan:

$$a = c_{\alpha/\gamma} - \frac{z_{\gamma_j}}{z_{\alpha_j} - z_{\gamma_j}} (c_{\alpha_{m_j}} - c_{\alpha/\gamma}) \quad (5.39)$$

$$b = \frac{c_{\alpha_{m_j}} - c_{\alpha/\gamma}}{z_{\alpha_j} - z_{\gamma_j}} \quad (5.40)$$

Calculando la derivada de la ecuación 5.38 y evaluándola para  $z = z_{\gamma_j}$  se obtiene:

$$\left. \frac{dc_\alpha}{dz} \right|_{z_{\gamma_j}^+} = \frac{c_{\alpha_{m_j}} - c_{\alpha/\gamma}}{z_{\alpha_j} - z_{\gamma_j}} \quad (5.41)$$

Reemplazando las ecuaciones 5.37 y 5.41 en 5.49 se obtiene la velocidad de la intercara:

$$\begin{aligned} \frac{dz_{\gamma_j}}{dt} = & \frac{D_\alpha \rho_\alpha}{(z_{\alpha_j} - z_{\gamma_j})} \frac{(c_{\alpha_{m_j}} - c_{\alpha/\gamma})}{(c_{\gamma/\alpha} \rho_\gamma - c_{\alpha/\gamma} \rho_\alpha)} \\ & - \frac{D_\gamma \rho_\gamma}{(z_{\gamma_j} - z_{\theta_j})} \frac{(c_{\gamma/\alpha} - c_{\gamma/\theta})}{(c_{\gamma/\alpha} \rho_\gamma - c_{\alpha/\gamma} \rho_\alpha)} \end{aligned} \quad (5.42)$$

donde  $c_{\alpha_{m_j}}$  es la concentración de carbono de la ferrita en  $z_{\alpha_j}$ .

La densidad  $\rho_\theta$  es calculada con la ecuación A.3 y la concentración  $c_{\gamma/\theta}$  es calculada con la ecuación A.16, encontrándose ambas en el Apéndice A. La concentración  $c_{\alpha_{m_j}}$  es calculada considerando conservación de la masa de carbono en el  $EV R_{m_j}$  resultando la siguiente expresión:

$$c_{\alpha_{m_j}} = \frac{2\rho_p c_p - [f_{\alpha_j^*} \rho_\alpha c_{\alpha/\gamma} + f_{\gamma_j^*} \rho_\gamma (c_{\gamma/\theta} + c_{\gamma/\alpha}) + 2f_{\theta_j^*} \rho_\theta c_\theta]}{f_{\alpha_j^*} \rho_\alpha} \quad (5.43)$$

donde  $f_{\alpha_j^*} = (z_{\alpha_j} - z_{\gamma_j})/z_{\alpha_j}$ ,  $f_{\gamma_j^*} = (z_{\gamma_j} - z_{\theta_j})/z_{\alpha_j}$  y  $f_{\theta_j^*} = z_{\theta_j}/z_{\alpha_j}$  son las fracciones volumétricas de ferrita, de austenita y de cementita, respectivamente, normalizadas respecto del volumen del  $EV R_{m_j}$ .

La fracción total de austenita es calculada mediante la suma de las fracciones de austenita estable y austenita metaestable:

$$f_\gamma = f_{\gamma_h} = f_{\gamma_s} + f_{\gamma_m} \quad (5.44)$$

### 5.3. Homogeneización de la concentración de carbono en la austenita

Una vez finalizada la transformación eutectoide inversa, comienza el proceso de enriquecimiento y homogeneización de carbono en la matriz austenítica. En esta etapa, el tamaño de las esferas de grafito disminuye debido a que el carbono migra hacia la matriz metálica que se ve enriquecida en dicho elemento. En la simulación de este proceso se tiene en cuenta la cantidad total y la distribución de tamaño de los nódulos de grafito y la composición química de la aleación.

### Elemento de volumen representativo

El elemento de volumen representativo esférico  $EVR_{h_i}$ , para cada familia de nódulos de grafito de igual tamaño, está formado por un nódulo de grafito rodeado por un halo de austenita; ver figura 5.6. El radio del  $EVR_{h_i}$  es calculado utilizando la siguiente ecuación:

$$r_{cel_i} = \left( \frac{3vol_{EVR_{h_i}}}{4\pi} \right)^{1/3} \quad (5.45)$$

donde  $vol_{EVR_{h_i}} = f_{set_i}/N_{set_i}$  es el volumen del  $EVR_{h_i}$ ; mientras que  $f_{set_i}$  es la fracción volumétrica inicial de los nódulos de grafito perteneciente a la familia  $i$ , normalizada respecto de la fracción inicial de nódulos de grafito  $f_{Gr_o}$ .

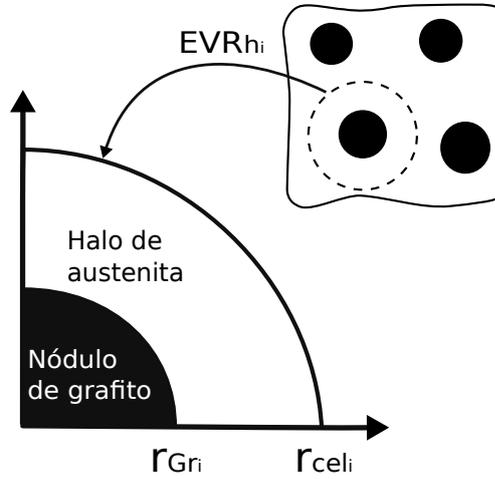


Figura 5.6: Elemento de volumen representativo  $EVR_{h_i}$  propuesto para el modelado de la homogeneización de la concentración de carbono en la austenita.

### Fracciones de fase

Teniendo en cuenta las familias de nódulos de grafito de igual tamaño, las fracciones en volumen de nódulos de grafito  $f_{Gr}$  y de austenita  $f_{\gamma}$  para un tiempo  $t$  son:

$$f_{Gr} = \frac{4\pi}{3} \sum_{i=1}^{nfamg} N_{set_i} r_{Gr_i}^3 \quad (5.46)$$

$$f_{\gamma} = f_{\gamma_h} = \frac{4\pi}{3} \sum_{i=1}^{nfamg} N_{set_i} \left( r_{cel_i}^3 - r_{Gr_i}^3 \right) \quad (5.47)$$

### Evolución de las fracciones de fase

La velocidad de cambio del radio del nódulo de grafito, para cada familia de nódulos de grafito, es computada a través del balance de masa de carbono en la intercara móvil nódulo de grafito-austenita, considerando difusión del carbono en régimen estacionario y conservación de la masa de carbono en el  $EVR_{h_i}$ . El perfil de la concentración de carbono se ilustra en la figura 5.7.

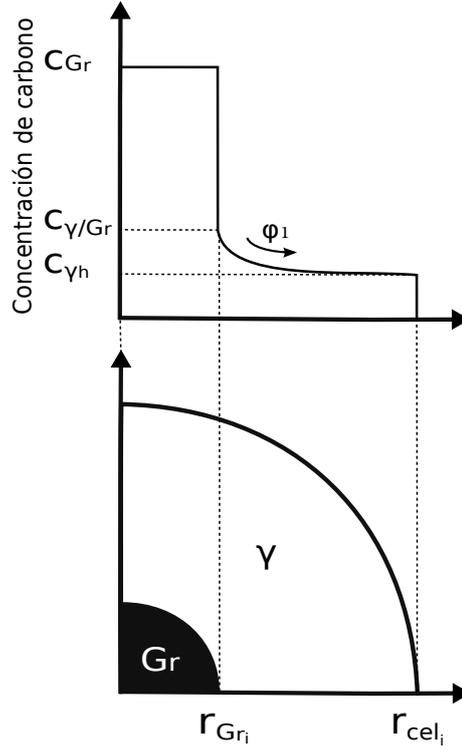


Figura 5.7: Perfil de concentración de carbono en el  $EVR_{h_i}$  durante el proceso de homogeneización de la concentración de carbono en la austenita.

La ecuación de balance de masa de carbono en la intercara móvil grafito-austenita es:

$$D_{\gamma}\rho_{\gamma}\left.\frac{dc_{\gamma}}{dr}\right|_{r_{Gr_i}^+} = \frac{dr_{Gr_i}}{dt}(c_{Gr}\rho_{Gr} - c_{\gamma/Gr}\rho_{\gamma}) \quad (5.48)$$

Despejando la velocidad de la intercara de la ecuación anterior se obtiene:

$$\frac{dr_{Gr_i}}{dt} = \frac{D_{\gamma}\rho_{\gamma}}{(c_{Gr}\rho_{Gr} - c_{\gamma/Gr}\rho_{\gamma})}\left.\frac{dc_{\gamma}}{dr}\right|_{r_{Gr_i}^+} \quad (5.49)$$

Para calcular la derivada del perfil de la concentración de carbono en la austenita, en la intercara grafito-austenita, primero se define dicho perfil a través de la segunda

## 5.4. Transformación ausferrítica

ley de Fick (en coordenadas radiales) considerando difusión de carbono en régimen estacionario:

$$c_\gamma = \frac{a}{r} + b \quad (5.50)$$

donde  $a$  y  $b$  son constantes a determinar. Teniendo en cuenta las siguientes condiciones de borde  $c_\gamma|_{r=r_{Gr_i}} = c_{\gamma/Gr}$  y  $c_\gamma|_{r=r_{cel_i}} = c_{\gamma_h}$ ,  $a$  y  $b$  resultan:

$$a = -\frac{r_{Gr_i}r_{cel_i}(c_{\gamma_h} - c_{\gamma/Gr})}{r_{cel_i} - r_{Gr_i}} \quad (5.51)$$

$$b = c_{\gamma/Gr} + \frac{r_{cel_i}(c_{\gamma_h} - c_{\gamma/Gr})}{r_{cel_i} - r_{Gr_i}} \quad (5.52)$$

Calculando la derivada de la ecuación 5.50 y evaluándola para  $r = r_{Gr_i}$  se obtiene:

$$\left. \frac{dc_\gamma}{dr} \right|_{r_{Gr_i}^+} = \frac{r_{cel_i}(c_{\gamma_h} - c_{\gamma/Gr})}{r_{Gr_i}(r_{cel_i} - r_{Gr_i})} \quad (5.53)$$

Reemplazando la ecuación anterior en la 5.49 se obtiene la velocidad de la intercara:

$$\frac{dr_{Gr_i}}{dt} = \frac{D_\gamma \rho_\gamma r_{cel_i}}{r_{Gr_i}(r_{cel_i} - r_{Gr_i})} \frac{(c_{\gamma_h} - c_{\gamma/Gr})}{(c_{Gr} \rho_{Gr} - c_{\gamma/Gr} \rho_\gamma)} \quad (5.54)$$

donde  $c_{\gamma_h}$  es la concentración de carbono de la austenita en  $r_{cel_i}$ .

La concentración  $c_{\gamma/Gr}$  es calculada con la ecuación A.14 que se encuentra en el Apéndice A, mientras que la concentración  $c_{\gamma_h}$  es calculada considerando conservación de la masa de carbono en el  $EV R_{h_i}$  resultando la siguiente expresión:

$$c_{\gamma_h} = \frac{2\rho_T c_T - 2f_{Gr_i^*} \rho_{Gr} c_{Gr} - f_{\gamma_i^*} \rho_\gamma c_{\gamma/Gr}}{f_{\gamma_i^*} \rho_\gamma} \quad (5.55)$$

donde  $f_{Gr_i^*} = (r_{Gr_i}/r_{cel_i})^3$  y  $f_{\gamma_i^*} = 1 - (r_{Gr_i}/r_{cel_i})^3$  son las fracciones volumétricas de nódulos de grafito y de austenita, respectivamente, normalizadas respecto del volumen del  $EV R_{h_i}$ .

## 5.4. Transformación ausferrítica

El modelo de la transformación ausferrítica predice la evolución de las fracciones de subunidades de ferrita y de austenita, teniendo en cuenta la cantidad total y la distribución de tamaño de los nódulos de grafito, el tamaño de las subunidades de ferrita, las temperaturas de austenizado y austemperizado, y la composición química de la aleación.

El modelo propuesto considera la nucleación y el crecimiento de las subunidades de ferrita. El mecanismo de crecimiento asumido es el displacivo porque, según lo

reportado en la bibliografía, éste proporciona una explicación adecuada de dicho fenómeno. La transformación comienza cuando en el enfriamiento la temperatura  $T$  del material es menor o igual que la temperatura de comienzo de la transformación ausferrítica  $T_{AS}$ , la cual se calcula con la ecuación A.23 que se encuentra en el Apéndice A. La transformación finaliza cuando la concentración de carbono en la austenita alcanza el valor de  $c_{\gamma_{T\sigma'}}$ , concentración para la cual los criterios termodinámicos de nucleación y de crecimiento de nuevas subunidades de ferrita, a la temperatura del proceso, no son satisfechos (ecuaciones 2.2 y 2.4).

### Elemento de volumen representativo

En el modelo, los nódulos de grafito son agrupados en familias en función de sus tamaños. La familia  $i$  está formada por todos los nódulos de grafito de radio  $r_{Gr_i}$ . Para cada familia de nódulos de grafito se propone un elemento de volumen representativo esférico  $EVR_{A_i}$ , el cual está formado por un nódulo de grafito rodeado de un matriz metálica, como se observa en la figura 5.8, y cuyo radio es  $r_{cel_i}$ .

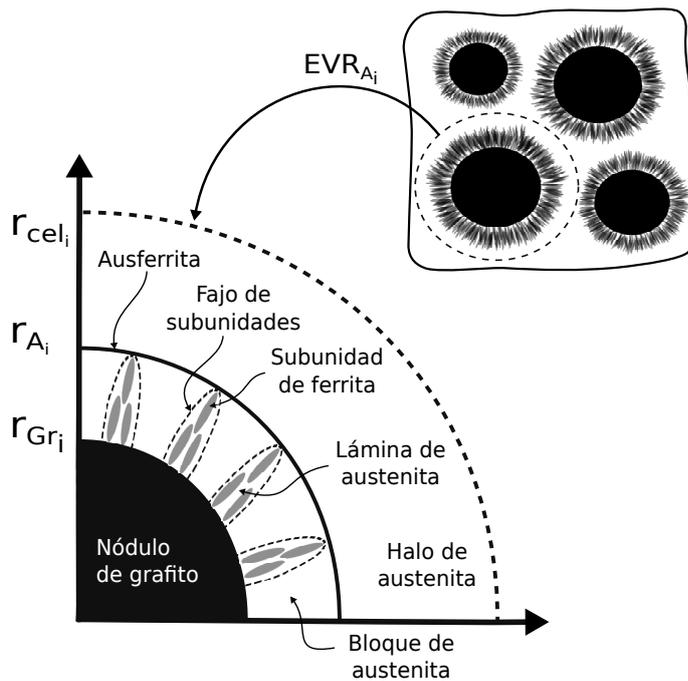


Figura 5.8: Elemento de volumen representativo  $EVR_{A_i}$  propuesto para modelar la transformación ausferrítica.

Al comienzo de la transformación, la matriz se encuentra formada por austenita con una concentración homogénea de carbono, mientras que, durante la transformación, la matriz se encuentra formada por austenita con una concentración no homogénea de carbono y por subunidades de ferrita.

El modelo considera tres regiones de austenita con diferentes concentraciones de carbono: (a) láminas de austenita que forman parte de los fajos de subunidades, (b) bloques de austenita que se ubican entre los fajos y (c) halo de austenita. Se considera que cada una de estas regiones tiene una concentración homogénea de carbono igual a  $c_{\gamma_{l_i}}$  para las láminas,  $c_{\gamma_{b_i}}$  para los fajos y  $c_{\gamma_{h_i}}$  para el halo.

La distribución de las fases dentro del  $EVR_{A_i}$  se definió de acuerdo a observaciones experimentales. Para el modelo, las láminas y los bloques de austenita, junto con las subunidades de ferrita, forman la ausferrita. La ausferrita es propuesta como una envoltura esférica alrededor del nódulo de grafito, cuyo radio exterior  $r_{A_i}$  crece durante la transformación. Esta envoltura de ausferrita puede ser observada experimentalmente por medio de microscopía óptica sólo cuando la transformación ausferrítica no ha finalizado [Fraś et al., 2012]. La austenita del  $EVR_{A_i}$  que no pertenece a la ausferrita se denomina halo de austenita; dicho halo es consumido a medida que crece el radio de la ausferrita. El halo de austenita se caracteriza por tener una concentración de carbono baja en comparación con la concentración de carbono de las láminas y de los bloques de austenita.

El modelo propone que las subunidades pueden nuclear y crecer tanto en la zona interna de la ausferrita como en la intercara ausferrita-halo de austenita. El crecimiento dentro de la ausferrita incrementa la fracción volumétrica de subunidades de ferrita, mientras que la fracción de ausferrita se mantiene constante. El crecimiento en la intercara ausferrita-halo de austenita incrementa la fracción volumétrica de ausferrita, mientras que la fracción de subunidades de ferrita se mantiene constante.

### Fracciones de fase

Las fracciones en volumen de los nódulos de grafito  $f_{Gr}$ , de ausferrita  $f_{Ausf}$  y de subunidades de ferrita  $f_{\alpha p}$  para un tiempo  $t$ , teniendo en cuenta las familias de nódulos de grafito, son evaluadas utilizando las siguientes ecuaciones:

$$f_{Gr} = \frac{4\pi}{3} \sum_{i=1}^{nfamg} N_{set_i} r_{Gr_i}^3 \quad (5.56)$$

$$f_{Ausf} = \frac{4\pi}{3} \sum_{i=1}^{nfamg} N_{set_i} \left( r_{A_i}^3 - r_{Gr_i}^3 \right) \quad (5.57)$$

$$f_{\alpha p} = \frac{4\pi}{3} \sum_{i=1}^{nfamg} f_{\alpha p_i} N_{set_i} r_{cel_i}^3 \quad (5.58)$$

donde  $f_{\alpha p_i}$  es la fracción en volumen de subunidades de ferrita respecto del volumen del  $EVR_{A_i}$ . Al igual que en la referencia [Kapturkiewicz et al., 2003], el intercambio de carbono entre la matriz metálica y los nódulos de grafito es despreciado; motivo por el cual la fracción en volumen de los nódulos de grafito se mantiene constante durante la transformación ausferrítica.

## Capítulo 5. Modelos de cambio de fase propuestos

Las fracciones en volumen de láminas de austenita  $f_{\gamma_l}$ , de bloques de austenita  $f_{\gamma_b}$  y de halo de austenita  $f_{\gamma_h}$  para un tiempo  $t$ , teniendo en cuenta las familias de nódulos de grafito, son evaluadas utilizando las ecuaciones siguientes:

$$f_{\gamma_l} = \frac{4\pi}{3} x_{\gamma f/\alpha p} \sum_{i=1}^{nfamg} f_{\alpha p_i} N_{set_i} r_{cel_i}^3 \quad (5.59)$$

$$f_{\gamma_b} = \frac{4\pi}{3} \sum_{i=1}^{nfamg} \left[ N_{set_i} \left( r_{A_i}^3 - r_{Gr_i}^3 \right) - f_{\alpha p_i} N_{set_i} (1 + x_{\gamma f/\alpha p}) r_{cel_i}^3 \right] \quad (5.60)$$

$$f_{\gamma_h} = \frac{4\pi}{3} \sum_{i=1}^{nfamg} N_{set_i} \left( r_{cel_i}^3 - r_{A_i}^3 \right) \quad (5.61)$$

donde  $x_{\gamma f/\alpha p}$  es la relación entre las fracciones en volumen de láminas de austenita y de subunidades de ferrita, de un fajo. Este concepto es equivalente a la relación entre los volúmenes de láminas de austenita y de subunidades de ferrita propuesta para aceros bainíticos [Rees and Bhadeshia, 1992b, Gaude-Fugarolas and Jacques, 2006]. Se asume que todos los fajos tienen una relación  $x_{\gamma f/\alpha p} = 0,12$  durante todo el proceso de transformación [Gaude-Fugarolas and Jacques, 2006].

La fracción volumétrica de austenita total es calculada con la siguiente ecuación:

$$f_{\gamma} = f_{\gamma_l} + f_{\gamma_b} + f_{\gamma_h} \quad (5.62)$$

### Evolución de la fracción de ausferrita

La evolución de la fracción volumétrica de ausferrita depende de la velocidad con la que se desplaza la intercara ausferrita-halo de austenita, como se observa en la ecuación 5.57. El crecimiento de la ausferrita se debe a la nucleación y crecimiento de nuevas subunidades de ferrita en la punta de los fajos, proceso caracterizado por ser discreto en el tiempo tal como fue descrito en el Capítulo 2.

A los efectos de la simulación, el modelo supone un crecimiento continuo del radio de la intercara ausferrita-halo de austenita, cuya velocidad de crecimiento es igual a la velocidad promedio con la que crecen, de manera discreta, las puntas de los fajos. Asumiendo que los fajos crecen con una disposición radial, la velocidad de crecimiento del radio de la intercara resulta:

$$\frac{dr_{A_i}}{dt} = \frac{l_{\alpha p}}{t_{inc_i} + t_{gro_i}} \quad (5.63)$$

donde  $l_{\alpha p}$  es la longitud de una subunidad. Además,  $t_{inc_i}$  y  $t_{gro_i}$  son el tiempo de incubación y de crecimiento de una familia de subunidades formada en la intercara ausferrita-halo de austenita. Una familia de subunidades está formada por un conjunto de subunidades cuyos núcleos comienzan el periodo de incubación al mismo tiempo. El proceso de crecimiento se supone instantáneo, es decir,  $t_{gro_i} = 0s$

[Matsuda and Bhadeshia, 2004], mientras que el tiempo de incubación de una familia de subunidades se calcula en el apartado correspondiente.

Debido a que en la literatura no se han encontrado mediciones de las dimensiones de las subunidades de ferrita en fundiciones de hierro nodular austemperizadas, y teniendo en cuenta que la matriz ausferrítica es similar a la de los aceros bainíticos con elevado contenido de silicio, el largo de las subunidades es evaluado como en la referencia [Matsuda and Bhadeshia, 2004]:

$$l_{cp} = 1 \times 10^{-5} \left( \frac{T - 255}{150} \right) [m] \quad (5.64)$$

Cuando se está desarrollando el crecimiento de la ausferrita, y la fracción de la misma es elevada, se producen contactos entre los halos vecinos de ausferrita como se ilustra en la figura 5.9. Dicho contacto produce la disminución de la velocidad de crecimiento de la ausferrita. Este fenómeno es tenido en cuenta mediante el coeficiente  $GI_A$  que multiplica al lado derecho de la ecuación 5.63 cuando los halos comienzan a estar en contacto [Su et al., 1985]:

$$GI_A = \left[ \frac{1 - (f_{Gr} + f_{Ausf})}{1 - f_{con_A}} \right]^{2/3} \quad (5.65)$$

donde  $f_{con_A}$  es la suma de las fracciones en volumen de grafito y ausferrita cuando los halos vecinos de ausferrita comienzan a estar en contacto. Al igual que en la referencia [Su et al., 1985], en este trabajo se considera  $f_{con_A} = 0,5$ .

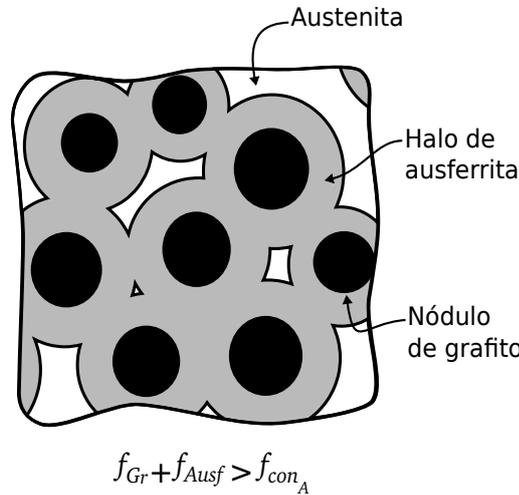


Figura 5.9: Contacto entre halos vecinos de ausferrita durante la transformación ausferrítica.

### Evolución de la fracción de subunidades de ferrita

Para determinar la evolución de la fracción volumétrica de subunidades de ferrita, respecto del volumen del  $EVR_{A_i}$ , se consideran los mismos conceptos básicos que los

empleados por Rees y Bhadeshia para aceros bainíticos [Rees and Bhadeshia, 1992a], resultando para el caso de la fundición nodular la siguiente expresión:

$$\frac{df_{\alpha p_i}}{dt} = \frac{u_{\alpha p} I_{\alpha p_i} N_{\alpha p s_i}}{vol_{EVR_{A_i}}} \quad (5.66)$$

donde  $u_{\alpha p}$  es el volumen de una subunidad,  $I_{\alpha p_i}$  es el número de familias de subunidades formadas en el interior de la ausferrita por unidad de tiempo,  $N_{\alpha p s_i}$  es el número de subunidades que componen a una familia de subunidades y  $vol_{EVR_{A_i}}$  es el volumen del  $EVR_{A_i}$ .

Como en la literatura no se han encontrado mediciones de las dimensiones de las subunidades de ferrita en fundiciones de hierro nodular austemperizadas, el volumen de una subunidad es evaluado como en la referencia [Matsuda and Bhadeshia, 2004]:

$$u_{\alpha p} = 2 \times 10^{-17} \left( \frac{T - 255}{150} \right)^3 [m^3] \quad (5.67)$$

Debido a la similitud que hay entre la transformación bainítica en aceros y la ausferrítica en fundiciones de hierro nodular, se ha tomado la idea de Matsuda y Bhadeshia, que relaciona el número de subunidades de ferrita que nuclean por unidad de tiempo con el tiempo de incubación de una subunidad de ferrita [Matsuda and Bhadeshia, 2004], para proponer una expresión que relaciona el número de familias de subunidades formadas en el interior de la ausferrita por unidad de tiempo con el tiempo de incubación de una familia de subunidades  $t_{inc_i}$  de la siguiente manera:

$$I_{\alpha p_i} = \frac{1}{t_{inc_i}} \quad (5.68)$$

La cantidad de subunidades de ferrita, de cada familia de subunidades formada en el interior de la ausferrita, depende del número de sitios de nucleación disponibles dentro de la ausferrita en el momento de su aparición. La cantidad de subunidades de ferrita, por familia de subunidades, se modela utilizando el concepto de volumen extendido, resultando la siguiente ecuación:

$$N_{\alpha p s_i} = (1 - \xi_i) N_{\alpha p s_i}^{ext} \quad (5.69)$$

donde  $N_{\alpha p s_i}^{ext}$  es el número de subunidades de ferrita por familia de subunidades, que nuclean y crecen dentro de un volumen extendido que representa el interior de la ausferrita, y  $\xi_i = f_{\alpha p_i} / f_{\alpha p_{max_i}^{ausf}}$  es un coeficiente que reduce el número de subunidades formadas teniendo en cuenta la disminución del número de sitios disponibles para la nucleación dentro de la ausferrita a medida que ésta contiene mayor cantidad de subunidades.  $f_{\alpha p_{max_i}^{ausf}}$  representa la fracción en volumen de subunidades de ferrita cuando la transformación se detiene. Cuando  $f_{\alpha p_i} = f_{\alpha p_{max_i}^{ausf}}$ , el coeficiente valdrá  $\xi_i = 1$ , impidiendo que se formen nuevas subunidades como se observa en la figura 5.10a. En la figura 5.10b se esquematiza la variación de  $N_{\alpha p s_i}$  y  $N_{\alpha p s_i}^{ext}$  con el tiempo.

#### 5.4. Transformación ausferrítica

La fracción en volumen  $f_{\alpha p_{max_i}}^{ausf}$  es evaluada de la siguiente manera:

$$f_{\alpha p_{max_i}}^{ausf} = \vartheta_i f_{Ausf_i} \quad (5.70)$$

donde  $f_{Ausf_i}$  es la fracción en volumen de la ausferrita, respecto del volumen del  $EVRA_i$ , la cual es calculada como  $f_{Ausf_i} = (r_{A_i}^3 - r_{Gr_i}^3)/r_{cel_i}^3$ . Además,  $\vartheta_i$  es la máxima fracción en volumen de subunidades de ferrita que puede formarse al final de la transformación ausferrítica para cada  $EVRA_i$  y se calcula de la siguiente manera:

$$\vartheta_i = \frac{c_{\gamma_{T_o'}} \rho_{\gamma_{T_o'}} - c_{\gamma_i} \rho_{\gamma_i}}{c_{\gamma_{T_o'}} \rho_{\gamma_{T_o'}} - c_{\alpha p} \rho_{\alpha p}} \quad (5.71)$$

donde  $c_{\gamma_i}$  y  $c_{\gamma_{T_o'}}$  son las concentraciones de carbono de la austenita al comienzo y al final de la transformación ausferrítica, respectivamente, y  $c_{\alpha p}$  es la concentración de carbono de las subunidades de ferrita. Además,  $\rho_{\gamma_i}$  y  $\rho_{\gamma_{T_o'}}$  son las densidades de la austenita al comienzo y al final de la transformación ausferrítica, respectivamente, y  $\rho_{\alpha p}$  es la densidad de las subunidades de ferrita. Asumiendo que se forman subunidades de ferrita superior, su concentración de carbono es  $c_{\alpha p} = 0,03\% \text{ peso}$  [Yescas and Bhadeshia, 2002]. Por otro lado,  $c_{\gamma_{T_o'}}$  se calcula con la ecuación A.13 que se encuentra en el Apéndice A.

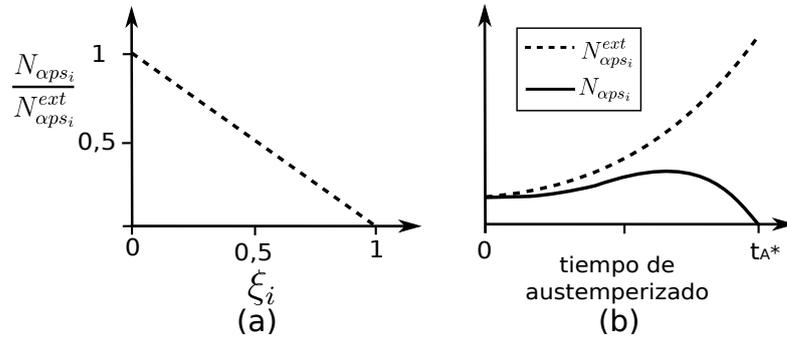


Figura 5.10: Variación de (a)  $N_{\alpha p_{s_i}}/N_{\alpha p_{s_i}}^{ext}$  respecto de  $\xi_i$  y (b)  $N_{\alpha p_{s_i}}$  y  $N_{\alpha p_{s_i}}^{ext}$  respecto del tiempo de austemperizado.  $t_A^*$  es el tiempo para el cual la transformación ausferrítica finaliza.

Reemplazando las ecuaciones 5.68 y 5.69 en 5.66 se obtiene que la evolución de la fracción en volumen de ferrita es:

$$\frac{df_{\alpha p_i}}{dt} = (1 - \xi_i) \frac{u_{\alpha p} N_{\alpha p_{s_i}}^{ext}}{vol_{EVRA_i} t_{inc_i}} \quad (5.72)$$

En los apartados siguientes se calculan el tiempo de incubación de una familia de subunidades y el número de subunidades de ferrita por familia de subunidades.

### Tiempo de incubación de una familia de subunidades

El tiempo de incubación de una familia de subunidades  $t_{inc_i}$  se supone dependiente de la energía de activación para la nucleación  $G_i$ , resultando la siguiente expresión:

$$t_{inc_i} \propto \frac{1}{\nu} \exp\left(\frac{G_i}{RT}\right) \quad (5.73)$$

donde  $\nu$  es un factor de frecuencia de intento, el cual está definido como  $\nu = k_b T/h$ , siendo  $k_b$  y  $h$  las constantes de Boltzmann y Planck, respectivamente;  $R$  es la constante universal de los gases. Esta idea es utilizada en distintos modelos desarrollados para simular la transformación bainítica en aceros [Rees and Bhadeshia, 1992a, Matsuda and Bhadeshia, 2004].

Para todos los potenciales sitios de nucleación, la energía de activación para la nucleación ( $G_i$ ) es considerada proporcional a la fuerza motriz para la transformación [Matsuda and Bhadeshia, 2004, Santofimia et al., 2006], de esta manera el tiempo de incubación de una familia de subunidades puede ser expresado como:

$$t_{inc_i} = \frac{k_1}{\nu} \exp\left[\frac{k_2}{RT} \left(1 + \frac{\Delta G_{m_i}}{k_3}\right)\right] \quad (5.74)$$

donde  $\Delta G_{m_i}$  es la máxima energía libre disponible para la nucleación en condiciones de paraequilibrio,  $k_1$  y  $k_2$  son parámetros empíricos que se obtienen ajustando el modelo y  $k_3$  es un parámetro igual a  $k_3 = 2540 J/mol$  [Rees and Bhadeshia, 1992a, Matsuda and Bhadeshia, 2004]. Esta propuesta está basada en la teoría de nucleación inicialmente desarrollada por Bhadeshia para aceros bainíticos con bajo contenido de carbono [Bhadeshia, 1981]. Dicha teoría fue validada en aceros bainíticos con alto contenido de carbono (0,98% peso) por Garcia-Mateo y Bhadeshia [Garcia-Mateo and Bhadeshia, 2004] y utilizada por Thomson *et al.* en fundición de hierro nodular austemperizada [Thomson et al., 2000].

Utilizando la misma idea que Rees y Bhadeshia para aceros bainíticos [Rees and Bhadeshia, 1992a], se propone la siguiente expresión para evaluar la máxima energía libre disponible para la nucleación:

$$\Delta G_{m_i} = \Delta G_{m_i}^o - f_{ab_i}(\Delta G_{m_i}^o - G_n) \quad (5.75)$$

donde  $\Delta G_{m_i}^o$  es la máxima energía libre disponible para la nucleación cuando la transformación ausferrítica comienza. La función  $f_{ab_i}$  permite tener en cuenta la influencia de la concentración de carbono de la austenita en  $\Delta G_{m_i}$ . Ambas variables son propias de cada  $EVR_{A_i}$ . Es importante remarcar que cuando  $f_{ab_i} = 1$  el criterio termodinámico relacionado con la nucleación no es satisfecho, ver ecuación 2.2, y por lo tanto no se produce la nucleación de nuevas subunidades de ferrita.

El valor de  $\Delta G_{m_i}^o$  es determinado usando el método de la tangente paralela que se encuentra descrito en la referencia [Bhadeshia, 1982]; mientras que  $f_{ab_i}$  se calcula con

#### 5.4. Transformación ausferrítica

una ecuación aquí propuesta, en la cual  $f_{ab_i}$  varía linealmente con la concentración de carbono en la austenita:

$$f_{ab_i} = \frac{c_{\gamma n z_i} - c_{\gamma_i}}{c_{\gamma T o'} - c_{\gamma_i}} \quad (5.76)$$

donde  $c_{\gamma n z_i}$  es la concentración de carbono en la austenita en la cual se va a producir la nucleación de las nuevas subunidades.

Para las subunidades que van a nuclear dentro de la ausferrita, se propone una concentración de carbono en la austenita  $c_{\gamma n z_i} = c_{\gamma b_i}$ , porque la nucleación ocurre en los bloques de austenita. La concentración de carbono de los bloques de austenita se determina considerando conservación de la masa de carbono dentro de la ausferrita:

$$c_{\gamma b_i} = \frac{f_{Aus f_i} c_{\gamma_i} \rho_{\gamma_i} - (f_{\alpha p_i} c_{\alpha p} \rho_{\alpha p} + f_{\gamma l_i} c_{\gamma l_i} \rho_{\gamma l_i})}{f_{\gamma b_i} \rho_{\gamma b_i}} \quad (5.77)$$

donde  $\rho_{\gamma l_i}$  y  $\rho_{\gamma b_i}$  son las densidades de las láminas y de los bloques de austenita, respectivamente, para un tiempo de transformación  $t$ , y  $\rho_{\gamma_i}$  es la densidad de la austenita al comienzo de la transformación ausferrítica. Se asume que la concentración de carbono de las láminas de austenita es igual a la concentración de carbono en la austenita cuando la transformación ausferrítica ha finalizado ( $c_{\gamma l_i} = c_{\gamma T o'}$ ), porque estas pequeñas láminas quedan atrapadas entre las subunidades de ferrita que componen un fajo, favoreciendo de este modo a su rápido enriquecimiento en carbono [Rees and Bhadeshia, 1992b, Gaude-Fugarolas and Jacques, 2006].

Para las subunidades que van a nuclear en la intercara ausferrita-halo de austenita, y dado que el contenido de carbono en la austenita a ambos lados de la intercara es diferente, se propone una concentración promedio de carbono  $c_{\gamma n z_i} = (c_{\gamma b_i} + c_{\gamma h_i})/2$ . Se asume que la concentración de carbono del halo de austenita es igual a la concentración de carbono en la austenita al final del austenizado ( $c_{\gamma h_i} = c_{\gamma_i}$ ).

#### Número de subunidades de ferrita de una familia de subunidades formada en el interior de la ausferrita

Las subunidades de ferrita que crecen dentro de la ausferrita tienen dos posibles sitios de nucleación. Experimentalmente se ha observado que las subunidades de ferrita pueden nuclear en la superficie del nódulo de grafito y en las puntas de las subunidades existentes que están en contacto con los bloques de austenita. La nucleación en la superficie de los nódulos de grafito tiene una gran importancia en la cinética de la transformación al comienzo, ya que la transformación se inicia en ese lugar. La nucleación en las puntas de las subunidades existentes tiene una gran importancia en la cinética cuando la transformación está avanzada, ya que en esta etapa el número de puntas de subunidades disponibles para la nucleación es elevado.

El modelo tiene en cuenta ambos sitios de nucleación. Para ello, se propone que el número de subunidades de ferrita por familia de subunidades sea igual a:

Capítulo 5. Modelos de cambio de fase propuestos

$$N_{\alpha p s_i}^{ext} = N_{\alpha p s_{gr_i}}^{ext} + N_{\alpha p s_{tip_i}}^{ext} \quad (5.78)$$

donde  $N_{\alpha p s_{gr_i}}^{ext}$  y  $N_{\alpha p s_{tip_i}}^{ext}$  son las cantidades de subunidades de ferrita, de una familia de subunidades, que nuclearon en la superficie del nódulo de grafito y en las puntas de las subunidades existentes, respectivamente, formadas en un volumen extendido que representa el interior de la ausferrita.

Se propone que al comienzo de la transformación ausferrítica, la cantidad de subunidades de ferrita de una familia de subunidades, formadas en la superficie del nódulo de grafito, sea máxima para luego disminuir hasta anularse a medida que la transformación avanza. De esta manera se tiene en cuenta la disminución de la superficie del nódulo disponible para la nucleación. Este comportamiento se modela mediante la siguiente ecuación:

$$N_{\alpha p s_{gr_i}}^{ext} = A_i(1 - \varphi_i) \quad (5.79)$$

donde  $A_i$  representa el número de subunidades de ferrita de la primera familia de subunidades en formarse y  $\varphi_i = f_{\alpha p_{gr_i}} / f_{\alpha p_{gr_i}}^{max}$  es un coeficiente que tiene en cuenta la disminución de la superficie del nódulo disponible para la nucleación.  $f_{\alpha p_{gr_i}}$  es la fracción en volumen de subunidades de ferrita en el tiempo  $t$  y  $f_{\alpha p_{gr_i}}^{max}$  es la máxima fracción en volumen de subunidades de ferrita que se puede formar, ambas sobre la superficie del nódulo de grafito; ver figura 5.11.

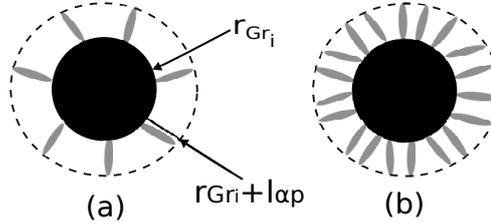


Figura 5.11: Nucleación de subunidades en la superficie del nódulo de grafito: (a) nucleación de la primera familia de subunidades ( $fams1$ ) y (b) nucleación de todas las posibles familias de subunidades que pueden formarse en la superficie del nódulo de grafito. En ambas figuras, se representa en línea de trazos la superficie que contiene a las familias de subunidades nucleadas en la superficie del nódulo.

La fracción  $f_{\alpha p_{gr_i}}^{max}$  es evaluada mediante la siguiente ecuación:

$$f_{\alpha p_{gr_i}}^{max} = \vartheta_i \frac{vol_{Ausf_i^{fams1}}}{vol_{EVR_{A_i}}} \quad (5.80)$$

donde  $vol_{Ausf_i^{fams1}} = 4\pi[(r_{Gr_i} - l_{\alpha p})^3 - r_{Gr_i}^3]/3$  es el volumen de ausferrita que contiene a la primera familia de subunidades ( $fams1$ ).

El número de subunidades de ferrita de la primera familia de subunidades se calcula con la siguiente ecuación:

#### 5.4. Transformación ausferrítica

$$A_i = \frac{vol_{\alpha p_i^{f_{ams1}}}}{u_{\alpha p}} \quad (5.81)$$

donde  $vol_{\alpha p_i^{f_{ams1}}} = f_{\alpha p_i^{f_{ams1}}} vol_{Ausf_i^{f_{ams1}}}$  es el volumen de subunidades de ferrita de la primera familia; siendo  $f_{\alpha p_i^{f_{ams1}}}$  la fracción volumétrica de la primera familia de subunidades de ferrita, respecto del volumen de la ausferrita que la contiene ( $vol_{Ausf_i^{f_{ams1}}}$ ). Los valores físicamente posibles de dicha fracción varían en el rango  $0 < f_{\alpha p_i^{f_{ams1}}} \leq \vartheta_i$ , asumiéndose en esta tesis  $f_{\alpha p_i^{f_{ams1}}} = \vartheta_i$ .

Se propone que la cantidad de subunidades de ferrita de una familia de subunidades formadas en las puntas de las subunidades existentes se incrementa a medida que avanza la transformación ausferrítica. Esta consideración se debe a que aumenta el número de puntas de subunidades en las cuales puede ocurrir la nucleación. Este comportamiento se modela mediante la siguiente ecuación:

$$N_{\alpha p_{stip_i}}^{ext} = B n_{\alpha p_i} \quad (5.82)$$

donde  $B$  es el número de nuevas subunidades que pueden formarse por cada subunidad existente y  $n_{\alpha p_i}$  es el número de subunidades existentes en las cuales la nueva familia de subunidades nucleará.

El número de nuevas subunidades que pueden formarse por cada subunidad existente se asume  $B = 1$ , porque se considera que cada subunidad tiene una punta en la cual una nueva subunidad puede formarse; ver figura 5.12. El valor de  $n_{\alpha p_i}$  es considerado igual al número total de subunidades dentro del  $EVR_{A_i}$  para un tiempo  $t$ , el cual se calcula con la siguiente ecuación:

$$n_{\alpha p_i} = \frac{f_{\alpha p_i} vol_{EVR_{A_i}}}{u_{\alpha p}} \quad (5.83)$$

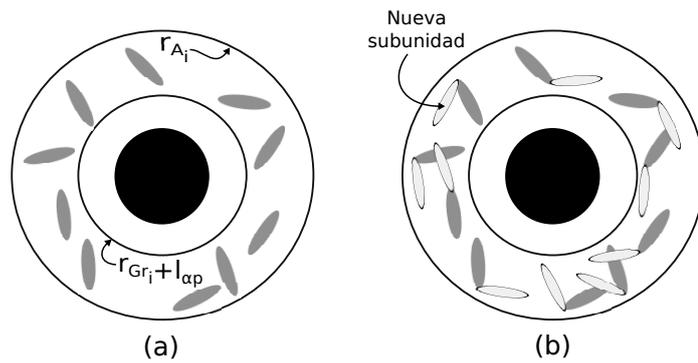


Figura 5.12: Nucleación de subunidades de ferrita en las puntas de las subunidades existentes de acuerdo al concepto de volumen extendido. Interior de la ausferrita (a) antes de una nueva nucleación y (b) después de una nueva nucleación.

## 5.5. Transformación martensítica

El modelo de la transformación martensítica predice la evolución de las fracciones de martensita y de austenita, teniendo en cuenta la composición química de las distintas zonas de la austenita. El modelo considera tres diferentes regiones de austenita: láminas de austenita, bloques de austenita y halos de austenita, ver figura 5.13.

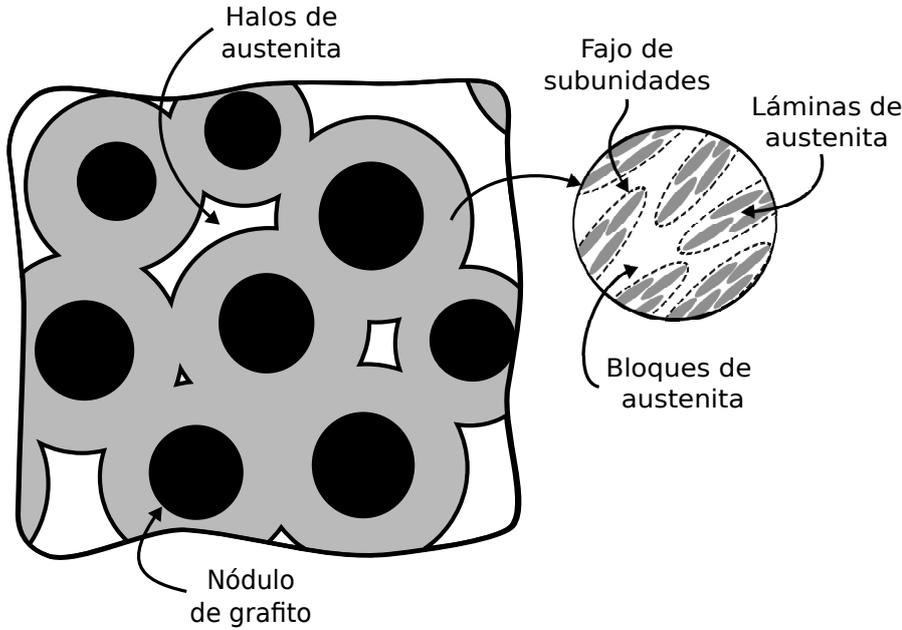


Figura 5.13: Idealización de la microestructura para modelar la transformación martensítica.

Las láminas de austenita tienen una concentración de carbono igual a  $c_{\gamma_i} = c_{\gamma_{T_0}}$  siendo lo suficientemente elevada como para evitar la transformación martensítica a temperatura ambiente. Por tal motivo, el modelo considera las fracciones en volumen de martensita que se forman a partir de los bloques de austenita ( $f_{m_b}$ ) cuando durante el enfriamiento la temperatura  $T$  del material es menor que la temperatura de comienzo de la transformación martensítica  $T_{MS_b}$ , y a partir de los halos de austenita ( $f_{m_h}$ ) cuando la temperatura  $T$  es menor que la temperatura  $T_{MS_h}$ . A los fines de simplificar el modelo, se propone que las regiones formadas por los bloques y los halos de austenita tienen concentraciones promedio de carbono.

### Fracciones de fase

Durante la transformación martensítica, el modelo considera que la fracción de nódulos de grafito se mantiene constante. Las fracciones en volumen de martensita, a una temperatura  $T$ , son calculadas mediante las siguientes ecuaciones:

$$f_{m_b} = f_{(\gamma_b \rightarrow m)} f_{\gamma_b^0} \quad (5.84)$$

## 5.5. Transformación martensítica

$$f_{m_h} = f_{(\gamma_h \rightarrow m)} f_{\gamma_h^o} \quad (5.85)$$

donde  $f_{(\gamma_b \rightarrow m)}$  y  $f_{(\gamma_h \rightarrow m)}$  son las fracciones volumétricas de bloques de austenita y de halos de austenita que se transforman en martensita, siendo dichas fracciones relativas al volumen inicial de los bloques y de los halos de austenita, respectivamente. Además,  $f_{\gamma_b^o}$  y  $f_{\gamma_h^o}$  son las fracciones volumétricas de bloques y de halos de austenita, respectivamente, al comienzo de la transformación martensítica.

Las fracciones  $f_{(\gamma_b \rightarrow m)}$  y  $f_{(\gamma_h \rightarrow m)}$  se calculan utilizando el modelo propuesto por Khan y Bhadeshia [Khan and Bhadeshia, 1990]:

$$\frac{-\ln(1 - f_{(\gamma_b \rightarrow m)})}{f_{(\gamma_b \rightarrow m)}} = 1 + c_2(T_{MS_b} - T) \quad (5.86)$$

$$\frac{-\ln(1 - f_{(\gamma_h \rightarrow m)})}{f_{(\gamma_h \rightarrow m)}} = 1 + c_2(T_{MS_h} - T) \quad (5.87)$$

donde  $c_2$  es un parámetro empírico del modelo. Las temperaturas de comienzo de la transformación martensítica para ambas regiones de austenita son evaluadas utilizando la ecuación A.24 que se encuentra en el Apéndice A.

Las fracciones en volumen de bloques y de halos de austenita para una temperatura  $T$  son iguales a:

$$f_{\gamma_b} = f_{\gamma_b^o} - f_{m_b} \quad (5.88)$$

$$f_{\gamma_h} = f_{\gamma_h^o} - f_{m_h} \quad (5.89)$$

Las fracciones volumétricas totales de martensita y de austenita son iguales a:

$$f_m = f_{m_b} + f_{m_h} \quad (5.90)$$

$$f_\gamma = f_{\gamma_b} + f_{\gamma_h} \quad (5.91)$$



# Capítulo 6

## Estudio de sensibilidad del modelo termomecánico-metalúrgico

### 6.1. Introducción

En el desarrollo de un modelo computacional, resulta fundamental analizar la influencia que las variables de entrada (también llamados factores) tienen sobre los resultados del modelo. Una de las maneras de determinar dicha influencia es mediante un análisis de sensibilidad [Cukier et al., 1973, Sobol', 1993, Homma and Saltelli, 1996, Chan et al., 1997, Saltelli et al., 2008].

Las principales motivaciones para realizar un análisis de sensibilidad en los modelos computacionales son las siguientes [Saltelli et al., 2008]:

- Identificar los factores que más contribuyen a la variación de los resultados. Como consecuencia de este análisis se puede (a) lograr un mejor entendimiento del modelo y (b) generar nuevas investigaciones que permitan conocer por qué los factores influyen de esa manera.
- Identificar los factores cuya influencia en los resultados es insignificante. Esta identificación es el paso inicial para realizar la simplificación del modelo, que consiste en fijar a un valor particular aquellos factores que prestaron poca influencia de los resultados.
- Identificar los factores que interactúan entre sí y entender de qué manera lo hacen.
- Analizar si los efectos encontrados para cada uno de los factores se corresponden con los observados, por ejemplo, en ensayos experimentales. De esta forma es posible encontrar errores de modelado como así también verificar la implementación computacional del modelo.

Los modelos determinísticos, como el presentado en esta tesis, comúnmente son sometidos a estudios de sensibilidad sencillos en los cuales se varía un factor a la vez

mientras se mantiene el resto de los factores constantes. En tales casos, generalmente no hay una cuantificación de la influencia de los factores reduciéndose el estudio a un análisis cualitativo. En esta tesis, el modelo termomecánico-metalúrgico presentado es sometido a un estudio de sensibilidad basado en la varianza, que permite cuantificar mediante índices la intensidad o la magnitud del efecto que tiene cada factor en la varianza total de las respuestas analizadas. Esta técnica propone evaluar el modelo para distintas combinaciones de factores. Estas combinaciones son generadas variando cuasi-aleatoriamente los factores del modelo dentro de un determinado rango de valores.

Las principales ventajas y desventajas de la técnica denominada análisis de sensibilidad basada en la varianza se resumen a continuación:

- Capacidad de detectar la influencia de primer orden y la influencia total de cada uno de los factores.
- Capacidad de detectar la interacción entre factores.
- Elevado costo computacional porque requiere una gran cantidad de simulaciones para calcular la varianza utilizando métodos numéricos.

En este Capítulo, en primer lugar se presenta la técnica utilizada para calcular los índices de sensibilidad de cada uno de los factores. Luego se presenta el estudio de sensibilidad del modelo propuesto en esta tesis, en el que se cuantifica la influencia de cada uno de los factores, indicando a su vez de qué manera éstos influyen en las distintas respuestas analizadas.

## 6.2. Análisis de sensibilidad basado en la varianza

A continuación se realiza una breve descripción del método basado en la varianza utilizado para realizar el análisis de sensibilidad. Si bien este tipo de análisis ha sido tratado por distintos autores, lo aquí presentado fue extraído de los trabajos de Saltelli *et al.* [Saltelli *et al.*, 2008, Saltelli *et al.*, 2010].

Desde el punto de vista de este tipo de análisis de sensibilidad, el modelo es una caja negra a la que ingresan factores (o variables de entrada) y salen resultados (o respuestas del modelo), y puede ser representado con una función que relaciona el resultado  $Y$  con los  $k$  factores  $X_i$ , como lo indica la siguiente ecuación:

$$Y = f(X_1, X_2, \dots, X_i, \dots, X_k) \quad (6.1)$$

Cuando los factores son variados simultáneamente dentro de un determinado rango de valores, la respuesta del modelo también varía. Si al fijar el valor de uno de los factores se reduce la varianza de la respuesta, significa que el modelo es sensible a ese factor. Mientras mayor sea la reducción de la varianza, más sensible es el modelo a ese factor.

## 6.2. Análisis de sensibilidad basado en la varianza

El análisis de sensibilidad basado en la varianza propone la determinación de índices de sensibilidad que cuantifican la contribución de los factores a la varianza total de los resultados. Mientras mayor sea la contribución de un factor, mayor será su índice de sensibilidad.

Si bien existen distintos tipos de índices de sensibilidad, en este trabajo se utilizarán el índice de sensibilidad de primer orden y el índice de efecto total, los cuales se describen en los apartados siguientes.

### Índice de sensibilidad de primer orden

Cuando se fija un factor  $X_i$  y se varían los restantes, es posible calcular la denominada varianza condicional de la respuesta del modelo  $V_{X_{\sim i}}(Y|X_i = x_i^*)$ . La varianza condicional permite medir la importancia relativa de  $X_i$  cuanto este factor es fijado a un valor  $X_i = x_i^*$  dado. Si la varianza condicional es pequeña, respecto de la varianza total  $V(Y)$ , significa que la variación de  $X_i$  tiene una gran importancia en la variación de los resultados.

La varianza condicional depende del valor particular de  $x_i^*$ , por tal motivo, es preferible determinar una varianza condicional promedio  $E_{X_i}(V_{X_{\sim i}}(Y|X_i))$ , para cuyo cálculo se considera la mayor cantidad posible de valores de  $x_i^*$ .

La varianza condicional promedio se relaciona con la varianza total de la siguiente manera:

$$V_{X_i}(E_{X_{\sim i}}(Y|X_i)) + E_{X_i}(V_{X_{\sim i}}(Y|X_i)) = V(Y) \quad (6.2)$$

donde la varianza condicional  $V_{X_i}(E_{X_{\sim i}}(Y|X_i))$  es denominada efecto de primer orden de  $X_i$  en  $Y$ .

De la ecuación anterior es posible definir el índice de sensibilidad de primer orden de  $X_i$  el cual es igual a:

$$S_i = \frac{V_{X_i}(E_{X_{\sim i}}(Y|X_i))}{V(Y)} = 1 - \frac{E_{X_i}(V_{X_{\sim i}}(Y|X_i))}{V(Y)} \quad (6.3)$$

El índice de sensibilidad de primer orden varía entre  $0 \leq S_i \leq 1$ . Un valor próximo a 1 indica que un factor  $X_i$  tiene una gran importancia en la respuesta del modelo, es decir  $E_{X_i}(V_{X_{\sim i}}(Y|X_i))$  pequeño o  $V_{X_i}(E_{X_{\sim i}}(Y|X_i))$  grande, respecto del valor de  $V(Y)$ .

### Índice de sensibilidad de alto orden

Cuando hay interacción entre los factores de un modelo, es común que existan respuestas extremas que sólo se consiguen para determinadas combinaciones de factores.

De acuerdo a la descomposición de ANOVA-HDMM, válida para factores independientes entre sí, la varianza total de la respuesta del modelo puede ser escrita como la suma de las contribuciones individuales más las contribuciones de las interacciones, tal como se muestra a continuación:

$$\sum_{i=1}^k V_i + \sum_{i=1}^k \sum_{j>i}^k V_{ij} + \sum_{i=1}^k \sum_{j>i}^k \sum_{l>j}^k V_{ijl} + \dots + V_{123\dots k} = V(Y) \quad (6.4)$$

De la ecuación anterior se puede verificar que la sumatoria de los índices de sensibilidad, de todos los órdenes, cumplen con la siguiente igualdad:

$$\sum_{i=1}^k S_i + \sum_{i=1}^k \sum_{j>i}^k S_{ij} + \sum_{i=1}^k \sum_{j>i}^k \sum_{l>j}^k S_{ijl} + \dots + S_{123\dots k} = 1 \quad (6.5)$$

Un modelo es aditivo cuando el efecto de sus factores puede ser separado en una descomposición de varianza de forma tal que  $\sum_i^k S_i = 1$ , es decir, que los índices de alto orden son nulos, indicando que no hay interacción entre factores. Por otro lado, en los modelos no aditivos la varianza total no puede ser expresada como la suma de las contribuciones individuales porque existe al menos un índice de alto orden no nulo ocasionado por la interacción entre factores, de forma tal que  $\sum_i^k S_i < 1$ .

Cuando se realiza un estudio de sensibilidad se deberían calcular los índices de sensibilidad de todos los órdenes. El número de índices depende del número de factores de la siguiente manera  $ns = 2^k - 1$ . Si el número de factores es  $k = 12$  la cantidad de índices a calcular serían  $ns = 4095$ , tarea que hoy en día requiere de mucho tiempo de cálculo.

### Índice de efecto total

Para evitar el cálculo de todos los índices de sensibilidad de alto orden, de los cuales muchos pueden valer cero, se puede calcular para cada uno de los factores un índice denominado de efecto total.

El índice de efecto total  $S_{T_i}$  para un factor  $X_i$  está compuesto por la suma de todos los índices de sensibilidad relacionados a este factor. Si por ejemplo el número de factores es  $k = 3$ , el índice de efecto total relacionado a  $X_1$  es  $S_{T_1} = S_1 + S_{12} + S_{13} + S_{123}$ .

Cuando se fijan todos los factores excepto el  $X_i$ , la varianza condicional de la respuesta del modelo es  $V_{X_i}(Y|X_{\sim i})$ . Como la varianza condicional depende de los valores particulares de  $x_{\sim i}^*$ , es preferible determinar una varianza condicional promedio  $E_{X_{\sim i}}(V_{X_i}(Y|X_{\sim i}))$ , considerando para su cálculo la mayor cantidad posible de valores de  $x_{\sim i}^*$ .

La varianza condicional promedio se relaciona con la varianza total de la siguiente manera:

$$V_{X_{\sim i}}(E_{X_i}(Y|X_{\sim i})) + E_{X_{\sim i}}(V_{X_i}(Y|X_{\sim i})) = V(Y) \quad (6.6)$$

De la ecuación anterior es posible definir el índice de efecto total de  $X_i$  como:

$$S_{T_i} = 1 - \frac{V_{X_{\sim i}}(E_{X_i}(Y|X_{\sim i}))}{V(Y)} = \frac{E_{X_{\sim i}}(V_{X_i}(Y|X_{\sim i}))}{V(Y)} \quad (6.7)$$

## 6.2. Análisis de sensibilidad basado en la varianza

Este índice varía entre  $0 \leq S_{Ti} \leq 1$ . Un valor próximo a 1 indica que el factor  $X_i$  tiene una gran importancia en la respuesta del modelo, es decir  $E_{X_{\sim i}}(V_{X_i}(Y|X_{\sim i}))$  grande o  $V_{X_{\sim i}}(E_{X_i}(Y|X_{\sim i}))$  pequeño, respecto del valor de  $V(Y)$ .

### Interpretación de los índices de sensibilidad

A continuación se interpretan los índices de sensibilidad anteriormente descriptos y algunos índices derivados de los mismos:

- Los índices de sensibilidad de primer orden  $S_i$  indican cuánto se podría reducir la varianza de la respuesta del modelo cuando  $X_i$  es fijado, sin tener en cuenta la interacción que existe entre factores. De esta forma  $S_i$  mide el principal efecto de  $X_i$  en el modelo.
- La suma de los índices de primer orden cumplen con la condición  $\sum_{i=1}^k S_i \leq 1$ . Para el caso de modelos aditivos (sin interacción entre factores) la suma es igual a  $\sum_{i=1}^k S_i = 1$ .
- La suma de todos los índices de efecto total cumplen con la condición  $\sum_{i=1}^k S_{Ti} \geq 1$ . Para el caso de modelos aditivos esta suma es igual a  $\sum_{i=1}^k S_{Ti} = 1$ .
- Por definición  $S_{Ti} \geq S_i$ . Cuando  $X_i$  no interactúa con otro factor se cumple la igualdad  $S_{Ti} = S_i$ .
- Para modelos no aditivos, el índice definido como  $1 - \sum_{i=1}^k S_i$  permite cuantificar el efecto que todas las interacciones tienen en el modelo.
- La diferencia  $S_{Ti} - S_i$  es un índice que permite medir cuánto interactúa  $X_i$  con otros factores. Cuando la diferencia entre  $S_{Ti}$  y  $S_i$  es grande significa que  $X_i$  interactúa fuertemente con otros factores. Si por ejemplo el número de factores es  $k = 3$  y  $i = 1$ , el mencionado índice es igual a  $S_{T1} - S_1 = S_{12} + S_{13} + S_{123}$ .
- Cuando  $X_i$  no influye en la respuesta del modelo, su índice de efecto total es  $S_{Ti} = 0$ .

### Cálculo de los índices de sensibilidad

Para computar los índices de sensibilidad de primer orden y de efecto total de un factor  $X_i$ , es necesario calcular las varianzas correspondientes a los resultados de un modelo, lo que requiere de la resolución de integrales. Cuando el modelo no es representado por una ecuación sencilla de integrar, se torna dificultoso encontrar la varianza por medio de una resolución analítica. Una alternativa es calcular las varianzas mediante un método numérico de integración denominado cuasi Montecarlo.

El método de integración de cuasi Montecarlo plantea aproximar el valor de una integral multidimensional de la siguiente manera:

$$\int_{\Omega} f(\bar{\mathbf{x}}) d\bar{\mathbf{x}} \cong \frac{V}{N} \sum_{i=1}^N f(\bar{\mathbf{x}}_i) \quad (6.8)$$

donde  $f(\bar{\mathbf{x}})$  es la función a integrar en el dominio  $\Omega$ ,  $V$  es el volumen del dominio definido como  $V = \int_{\Omega} d\bar{\mathbf{x}}$  y  $N$  es el número de puntos  $\bar{\mathbf{x}}_i$  considerados para realizar la aproximación de la integral, con  $\bar{\mathbf{x}}_i \in \Omega$ . Los valores de  $\bar{\mathbf{x}}_i$  son generados utilizando una secuencia de números de baja discrepancia, como por ejemplo la secuencia de *Sobol'* [Sobol' et al., 1992]. El uso de una secuencia de estas características es lo que diferencia a los métodos de integración de Montecarlo y cuasi Montecarlo, siendo este último el de mayor rapidez de convergencia para este tipo de aplicaciones.

Para calcular la varianza numéricamente por medio del método de integración de cuasi Montecarlo, el modelo tiene que ser resuelto para distintas combinaciones de factores. Para armar estas distintas combinaciones, primero se definen dos matrices de factores denominadas  $A$  y  $B$ . En las columnas de estas matrices se encuentran los valores de los  $k$  factores considerados en el análisis de sensibilidad del modelo; mientras que en cada una de sus filas se ubican las distintas combinaciones de factores, representando cada una de ellas a los distintos casos a simular también denominados ejemplares. El número total de filas se denomina base de ejemplares y se lo simboliza con la letra  $N$ . Las dimensiones de las matrices  $A$  y  $B$  son  $N \times k$ , como se observa a continuación:

$$A = \begin{bmatrix} a_1^{(1)} & a_2^{(1)} & \dots & a_i^{(1)} & \dots & a_k^{(1)} \\ a_1^{(2)} & a_2^{(2)} & \dots & a_i^{(2)} & \dots & a_k^{(2)} \\ \vdots & \vdots & & \vdots & & \vdots \\ a_1^{(j)} & a_2^{(j)} & \dots & a_i^{(j)} & \dots & a_k^{(j)} \\ \vdots & \vdots & & \vdots & & \vdots \\ a_1^{(N)} & a_2^{(N)} & \dots & a_i^{(N)} & \dots & a_k^{(N)} \end{bmatrix} \quad (6.9)$$

$$B = \begin{bmatrix} b_1^{(1)} & b_2^{(1)} & \dots & b_i^{(1)} & \dots & b_k^{(1)} \\ b_1^{(2)} & b_2^{(2)} & \dots & b_i^{(2)} & \dots & b_k^{(2)} \\ \vdots & \vdots & & \vdots & & \vdots \\ b_1^{(j)} & b_2^{(j)} & \dots & b_i^{(j)} & \dots & b_k^{(j)} \\ \vdots & \vdots & & \vdots & & \vdots \\ b_1^{(N)} & b_2^{(N)} & \dots & b_i^{(N)} & \dots & b_k^{(N)} \end{bmatrix} \quad (6.10)$$

donde las componentes de las matrices, para el estudio realizado en esta tesis, son propuestas como  $a_i^{(j)} = f_i + \Delta f_i q r_i^{(j)}$  y  $b_i^{(j)} = f_i + \Delta f_i q r_{k+i}^{(j)}$ . Las variables  $q r_i^{(j)}$  y  $q r_{k+i}^{(j)}$  son las componentes de una matriz  $QR(N, 2k)$  cuyos elementos varían cuasi aleatoriamente

### 6.3. Estudio de sensibilidad del modelo

entre 0 y 1,  $f_i$  es el mínimo valor que puede tomar un factor  $i$  ( $f_i = f_{min_i}$ ) y  $\Delta f_i$  está definido como  $\Delta f_i = f_{max_i} - f_{min_i}$  siendo  $f_{max_i}$  el máximo valor que puede tomar el factor  $i$ .

Utilizando las matrices  $A$  y  $B$  se arman  $k$  matrices denominadas  $C_i$  (con  $i = 1, \dots, k$ ). La columna  $i$  de la matriz  $C_i$  pertenece a la columna  $i$  de la matriz  $A$ , mientras que las restantes columnas pertenecen a la matriz  $B$  como se observa a continuación:

$$C_i = \begin{bmatrix} b_1^{(1)} & b_2^{(1)} & \dots & a_i^{(1)} & \dots & b_k^{(1)} \\ b_1^{(2)} & b_2^{(2)} & \dots & a_i^{(2)} & \dots & b_k^{(2)} \\ \vdots & \vdots & & \vdots & & \vdots \\ b_1^{(j)} & b_2^{(j)} & \dots & a_i^{(j)} & \dots & b_k^{(j)} \\ \vdots & \vdots & & \vdots & & \vdots \\ b_1^{(N)} & b_2^{(N)} & \dots & a_i^{(N)} & \dots & b_k^{(N)} \end{bmatrix} \quad (6.11)$$

El modelo es resuelto para las  $N(2 + k)$  combinaciones de factores. Las respuestas del modelo son agrupadas en tantos vectores columna como matrices de factores se tiene [ $Y_A = f(A)$ ,  $Y_B = f(B)$  y  $Y_{C_i} = f(C_i)$ ].

Finalmente, los índices de sensibilidad de primer orden y de efecto total son evaluados mediante las siguientes expresiones:

$$S_i = \frac{\frac{1}{N} \sum_{j=1}^N (y_A^{(j)} y_{C_i}^{(j)}) - \frac{1}{N^2} \sum_{j=1}^N (y_A^{(j)}) \sum_{j=1}^N (y_{C_i}^{(j)})}{\frac{1}{N} \sum_{j=1}^N (y_A^{(j)})^2 - \left[ \frac{1}{N} \sum_{j=1}^N (y_A^{(j)}) \right]^2} \quad (6.12)$$

$$S_{Ti} = 1 - \frac{\frac{1}{N} \sum_{j=1}^N (y_B^{(j)} y_{C_i}^{(j)}) - \left[ \frac{1}{N} \sum_{j=1}^N (y_B^{(j)}) \right]^2}{\frac{1}{N} \sum_{j=1}^N (y_A^{(j)})^2 - \left[ \frac{1}{N} \sum_{j=1}^N (y_A^{(j)}) \right]^2} \quad (6.13)$$

donde  $y_A^{(j)}$ ,  $y_B^{(j)}$  y  $y_{C_i}^{(j)}$  son los elementos  $j$  de los vectores  $Y_A$ ,  $Y_B$  y  $Y_{C_i}$ , respectivamente.

### 6.3. Estudio de sensibilidad del modelo

A continuación se presentan dos estudios de sensibilidad del modelo termomecánico-metalúrgico propuesto en esta tesis. El primero de ellos analiza la influencia de la variación de los factores de entrada del modelo en las fracciones de fase finales, en los cambios de dimensiones y en los tiempos requeridos para obtener un austenizado y un austemperizado completos. En todos los especímenes simulados en este primer estudio, la matriz final es completamente ausferrítica. En el segundo estudio se analiza la influencia de los factores de entrada y también del tiempo de austemperizado en las fracciones de fase finales y en los cambios de dimensiones. Para

todos los especímenes simulados en este segundo estudio, la matriz final varía desde una completamente martensítica hasta una completamente ausferrítica.

Para las simulaciones se consideran ejemplares cilíndricos de pequeñas dimensiones ( $2,5\text{mm}$  de diámetro y  $2,5\text{mm}$  de largo) con la finalidad de obtener una microestructura lo más homogénea posible en todo el volumen de la probeta. De esta manera, la influencia de la variación de la geometría y de las dimensiones de los ejemplares no son analizadas. Debido a la simetría de las probetas, éstas fueron discretizadas usando elementos finitos axisimétricos de cuatro nodos. Las propiedades térmicas y mecánicas de la fundición de hierro nodular se muestran en las tablas A.1 y A.2 del Apéndice A.

Para simplificar el análisis se considera que todos los ejemplares tienen una familia de nódulos de grafito y una familia de colonias de perlita ( $nfamg = 1$  y  $nfamc = 1$ ). Los valores propuestos para los parámetros del modelo de la transformación ausferrítica son  $k_1 = 4,5 \times 10^{15}$  y  $k_2 = 10,9 \times 10^3 \text{ J/mol}$ , mientras que el parámetro del modelo de la transformación martensítica es  $c_2 = 0,029$ . Los calores latente de cambio de fase para las transformaciones eutectoide inversa estable, eutectoide inversa metaestable y ausferrítica son  $L_{\alpha \rightarrow \gamma} = 5,8 \times 10^4 \text{ J/Kg}$ ,  $L_{p \rightarrow \gamma} = 1,28 \times 10^4 \text{ J/Kg}$  y  $L_{\gamma \rightarrow \alpha p} = 5,8 \times 10^4 \text{ J/Kg}$ , respectivamente [Lacaze and Gerval, 1998, Kapturkiewicz et al., 2005].

El coeficiente de transferencia de calor por convección-radiación entre la probeta y el medio ambiente es  $h = 70 \text{ J/(s m}^2 \text{ }^\circ\text{C)}$  durante todo el calentamiento y durante el enfriamiento desde la temperatura de austemperizado hasta la ambiente; mientras que es igual a  $h = 400 \text{ J/(s m}^2 \text{ }^\circ\text{C)}$  durante el enfriamiento desde la temperatura de austenizado hasta la temperatura de austemperizado.

### 6.3.1. Estudio de sensibilidad 1

El presente estudio tiene como objetivo analizar la respuesta del modelo propuesto en la simulación de un tratamiento térmico de austemperizado con austenizado y austemperizado completos. Los factores considerados son los siguientes:

- Composición química de la fundición de hierro nodular.
- Microestructura inicial: fracción en volumen de ferrita respecto del volumen de la matriz ( $f_{\alpha s_o/m}$ ), conteo de nódulos de grafito y espaciado interlaminar de perlita.
- Temperaturas de austenizado y austemperizado.

Las respuestas del modelo analizadas en este estudio se presentan a continuación y se señalan en el esquema de la figura 6.1:

- Tiempo requerido para que la fracción en volumen de austenita alcance su máximo valor ( $t_\gamma$ ). Esto ocurre a la temperatura de austenizado cuando la concentración de carbono en la austenita es homogénea.
- Tiempo transcurrido desde el comienzo hasta la finalización de la transformación ausferrítica ( $t_A$ ).

### 6.3. Estudio de sensibilidad del modelo

- Fracción volumétrica de subunidades de ferrita al final del tratamiento térmico ( $f_{\alpha p_{fin}}$ ).
- Fracción volumétrica de austenita al final del tratamiento térmico ( $f_{\gamma_{fin}}$ ).
- Variación de la longitud de la probeta al final del tratamiento térmico respecto de la longitud inicial de la probeta ( $vd_{fin}$ ). Esta variación se define como el cociente entre el desplazamiento del extremo no restringido de la probeta, al final del tratamiento térmico, y la longitud inicial de la probeta ( $vd_{fin} = \Delta l_{fin}/l_o$ ).

Con la configuración mencionada del tratamiento térmico no se obtuvo martensita al final de dicho proceso, por tal motivo, no es considerada como una respuesta a analizar.

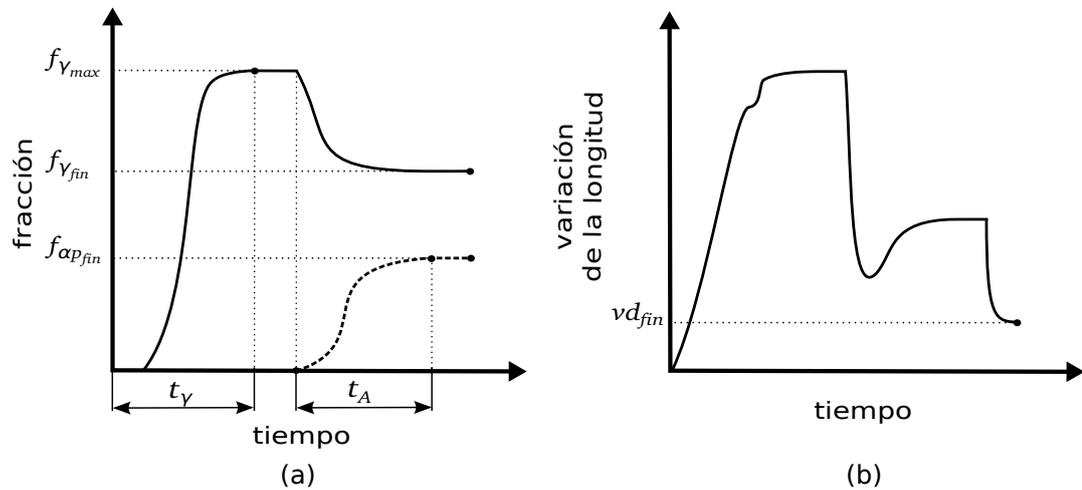


Figura 6.1: Respuestas del modelo analizadas en el estudio de sensibilidad 1.

El número total de factores es  $k = 12$  y en la tabla 6.1 se muestran los valores máximos y mínimos que pueden tomar cada uno de ellos, los cuales fueron determinados teniendo en cuenta los valores que generalmente se utilizan en los ensayos experimentales reportados en la literatura. Para obtener la solución numérica de los índices de sensibilidad, se utiliza una base de ejemplares igual a  $N = 10000$ .

Capítulo 6. Estudio de sensibilidad del modelo TMM

<b>i</b>	<b>Factor</b>	<b>f<sub>min<sub>i</sub></sub></b>	<b>f<sub>max<sub>i</sub></sub></b>
1	<i>C</i>	3,3	3,8
2	<i>Si</i>	2,5	3,5
3	<i>Mn</i>	0,25	0,5
4	<i>Cr</i>	0	0,04
5	<i>Ni</i>	0,5	3,5
6	<i>Cu</i>	0,5	1
7	<i>Mo</i>	0	0,3
8	$f_{\alpha s_o/m}$	0	1
9	$N_{set}$	$8 \times 10^{12}$	$1,18 \times 10^{14}$
10	<i>ips</i>	$0,5 \times 10^{-6}$	$0,5 \times 10^{-5}$
11	$T_\gamma$	870	950
12	$T_A$	300	450

Tabla 6.1: Factores considerados en el estudio de sensibilidad 1. La composición química se encuentra en %*peso*, el conteo de nódulos de grafito en *nod/m<sup>3</sup>*, el espaciado interlaminar de la perlita en *m* y las temperaturas de austenizado y austemperizado en °C.

### Análisis de los resultados

En las tablas 6.2 y 6.3 se presentan los índices de sensibilidad de primer orden y de efecto total, respectivamente. Debido al método numérico empleado para calcular los índices de sensibilidad, algunos resultaron tener un valor negativo muy próximo a cero. En tales casos estos índices fueron redondeados a cero, tal como se propone en la referencia [Saltelli et al., 2008], y se representan en la tabla como  $-0,0$ .

A continuación se analiza cómo afecta cada uno de los factores a las respuestas.

<b>i</b>	<b>Factor</b>	<b>S<sub>i</sub></b>				
		$t_\gamma$	$t_A$	$f_{\alpha p_{fin}}$	$f_{\gamma_{fin}}$	$vd_{fin}$
1	<i>C</i>	0,04	0,0	0,0	0,0	0,0
2	<i>Si</i>	0,0	0,0	0,0	0,0	0,02
3	<i>Mn</i>	0,04	0,0	0,0	0,0	0,0
4	<i>Cr</i>	-0,0	0,0	0,02	0,02	0,0
5	<i>Ni</i>	0,02	0,0	0,05	0,06	0,06
6	<i>Cu</i>	-0,0	0,0	0,02	0,01	0,0
7	<i>Mo</i>	0,04	0,0	0,10	0,10	0,01
8	$f_{\alpha s_o/m}$	-0,0	0,0	-0,0	-0,0	<b>0,85</b>
9	$N_{set}$	<b>0,63</b>	0,22	-0,0	-0,0	0,0
10	<i>ips</i>	-0,0	0,0	-0,0	-0,0	0,0
11	$T_\gamma$	0,05	0,0	<b>0,70</b>	<b>0,70</b>	0,06
12	$T_A$	-0,0	<b>0,73</b>	0,10	0,09	0,0

Tabla 6.2: Índices de sensibilidad de primer orden para cada una de las respuestas analizadas en el estudio de sensibilidad 1.

### 6.3. Estudio de sensibilidad del modelo

i	Factor	S <sub>Ti</sub>				
		$t_\gamma$	$t_A$	$f_{\alpha p_{fin}}$	$f_{\gamma_{fin}}$	$vd_{fin}$
1	<i>C</i>	-0,0	0,0	0,0	0,0	0,0
2	<i>Si</i>	-0,0	-0,0	0,0	0,0	0,02
3	<i>Mn</i>	-0,0	-0,0	0,0	0,0	-0,0
4	<i>Cr</i>	-0,0	-0,0	0,02	0,01	-0,0
5	<i>Ni</i>	-0,0	-0,0	0,05	0,07	0,07
6	<i>Cu</i>	-0,0	-0,0	0,02	0,03	0,0
7	<i>Mo</i>	-0,0	-0,0	0,10	0,10	0,0
8	$f_{\alpha s_o/m}$	-0,0	-0,0	0,0	0,0	<b>0,86</b>
9	$N_{set}$	<b>0,92</b>	0,27	0,0	0,0	-0,0
10	<i>ips</i>	-0,0	-0,0	0,0	0,0	-0,0
11	$T_\gamma$	0,08	0,0	<b>0,71</b>	<b>0,71</b>	0,06
12	$T_A$	-0,0	<b>0,79</b>	0,11	0,10	0,0

Tabla 6.3: Índices de sensibilidad de efecto total para cada una de las respuestas analizadas en el estudio de sensibilidad 1.

- *Tiempo requerido para que la fracción en volumen de la austenita alcance su máximo valor a la temperatura de austenizado:*

Como puede verse en la tabla 6.3 el factor que más influye en el tiempo requerido para que la fracción en volumen de austenita alcance su máximo valor es el conteo de nódulos de grafito. En una menor medida influyen la temperatura de austenizado y la concentración inicial de carbono. Los demás factores no influyen globalmente en dicho tiempo porque sus índices de efecto total son prácticamente nulos.

La influencia que tiene el conteo de nódulos de grafito se observa en la figura 6.2a. A medida que aumenta el conteo de nódulos, disminuye el tiempo  $t_\gamma$ . La influencia que tiene la temperatura de austenizado se observa en la figura 6.2b. A medida que disminuye la temperatura, aumenta el tiempo  $t_\gamma$ .

La velocidad de las transformaciones que se desarrollan durante el austenizado depende principalmente de: (a) la capacidad que tienen los átomos de carbono en difundir dentro de la matriz metálica y (b) la distancia a recorrer por los átomos de carbono durante la difusión. Cuando mayor sea el tamaño del elemento de volumen representativo, como ocurre cuando los nódulos de grafito son grandes, mayor es la distancia a recorrer por los átomos de carbono en la matriz metálica y, por lo tanto, mayor será el tiempo necesario para que la concentración de carbono en la austenita sea homogénea. Por otro lado, mientras mayor sea el coeficiente de difusión de carbono, como ocurre cuando la temperatura de austenizado es alta, menor será el tiempo necesario para que la concentración de carbono en la austenita sea homogénea. Es importante remarcar que la máxima fracción en volumen de austenita se alcanza a la temperatura de austenizado cuando la concentración de carbono en la austenita es homogénea.

En las figuras 6.2a y 6.2b se observa que la dispersión del tiempo  $t_\gamma$  aumenta a medida que el conteo de nódulos de grafito y la temperatura de austenizado disminuyen.

Este comportamiento se debe a la interacción que hay entre ambos factores, lo cual se confirma analizando sus respectivos índices de sensibilidad de primer orden y de efecto total. En la figura 6.3 se pone de manifiesto dicha interacción, indicándose en ella el máximo valor que toma el tiempo  $t_\gamma$ , el cual es obtenido cuando el valor del conteo de nódulos de grafito y de la temperatura de austenizado son mínimos.

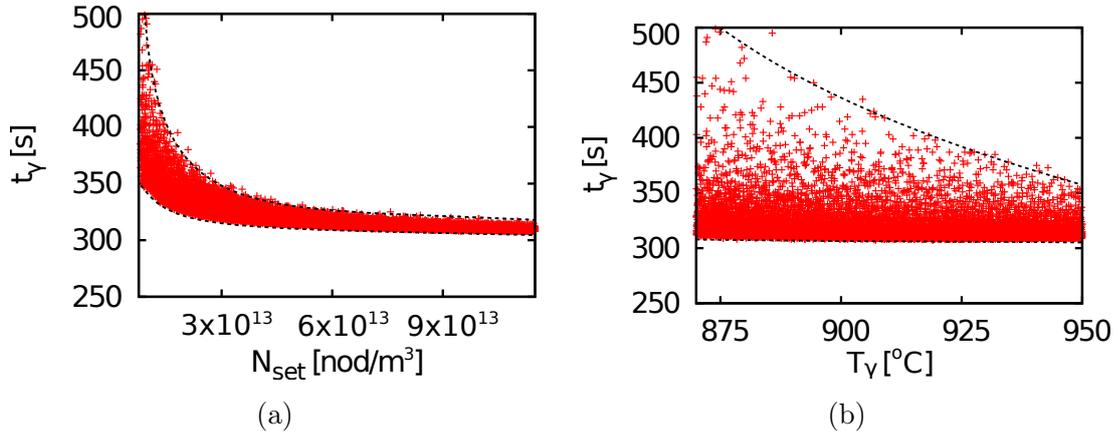


Figura 6.2: Diagrama de dispersión del tiempo requerido para que la fracción volumétrica de austenita alcance su máximo valor. Influencia de (a) el conteo de nódulos de grafito y (b) la temperatura de austenizado.

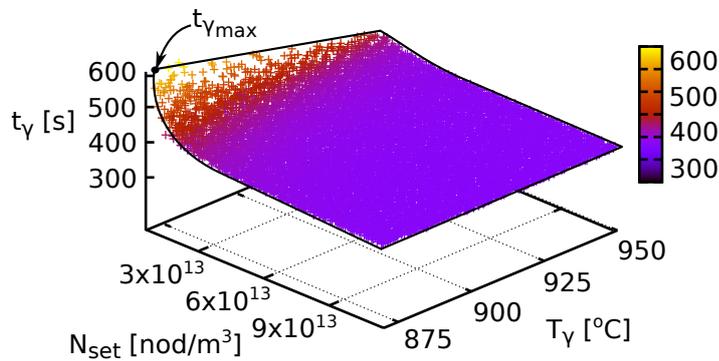


Figura 6.3: Diagrama de dispersión del tiempo requerido para que la fracción en volumen de la austenita alcance su máximo valor en función del conteo de nódulos de grafito y de la temperatura de austenizado.

- *Tiempo requerido para que la transformación ausferrítica finalice:*

Como puede verse en la tabla 6.3 el factor que más afecta a la extensión en el tiempo de la transformación ausferrítica es la temperatura de austemperizado, siguiendo en orden de importancia el conteo de nódulos de grafito. Comparando los índices de sensibilidad de efecto total y de primer orden es posible identificar una pequeña interacción entre ambos factores. Los demás factores no afectan globalmente, debido a que sus índices de efecto total son prácticamente nulos. Por tal motivo, según el modelo, el tiempo requerido para finalizar la transformación ausferrítica depende

### 6.3. Estudio de sensibilidad del modelo

fundamentalmente de la temperatura de austemperizado y del conteo de nódulos de grafito.

El efecto que tiene la temperatura de austemperizado se observa en la figura 6.4a. A medida que aumenta la temperatura, disminuye el tiempo de austemperizado. Este incremento en la velocidad de la transformación ausferrítica se debe principalmente a: (a) la disminución del tiempo de incubación de las familias de subunidades de ferrita y (b) el aumento del tamaño de las subunidades de la ferrita.

La influencia que tiene el conteo de nódulos de grafito se puede observar en la figura 6.4b. A medida que aumenta el conteo de nódulos, disminuye el tiempo de austemperizado. Cuando el tamaño de los nódulos de grafito disminuye, según el modelo presentado, adquiere mayor importancia la nucleación de subunidades de ferrita en la superficie de los nódulos de grafito. La cinética de la transformación de esas subunidades tiene una mayor velocidad que la cinética de la transformación de las subunidades que nuclean en las puntas de las subunidades existentes. De esta forma se explica el comportamiento del modelo.

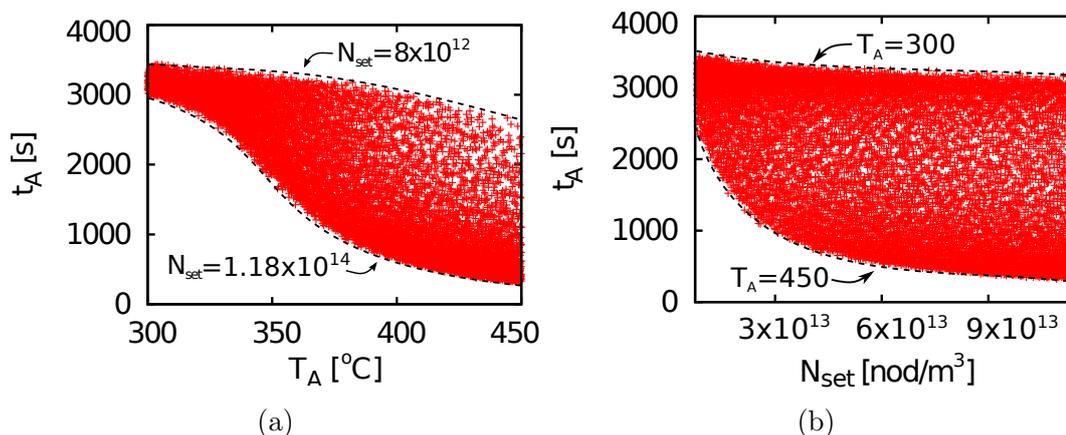


Figura 6.4: Diagrama de dispersión de la duración de la transformación ausferrítica. Influencia de (a) la temperatura de austemperizado y (b) el conteo de nódulos de grafito.

Comparando las figuras 6.4a y 6.4b es posible observar que el efecto de la temperatura de austemperizado es mayor que el efecto del conteo de nódulos de grafito. Ambos factores se tornan más importantes a medida que disminuyen sus valores, hecho que es manifestado en la figura como una disminución en la dispersión de los valores del tiempo de austemperizado. El mayor valor del mencionado tiempo se obtiene para los mínimos valores de la temperatura de austemperizado y del conteo de nódulos de grafito, mientras que el mínimo valor del tiempo se obtiene para los máximos valores de estos factores, como se observa en la figura 6.5.

- *Fracción en volumen de subunidades de ferrita al final del tratamiento térmico:*

Como puede verse en la tabla 6.3 el factor que más influye en la fracción en volumen de subunidades de ferrita es la temperatura de austemperizado. Le siguen en orden de importancia la temperatura de austemperizado y las concentraciones

iniciales de molibdeno, de níquel, de cobre y de cromo. Todos los factores mencionados prácticamente no presentan interacciones.

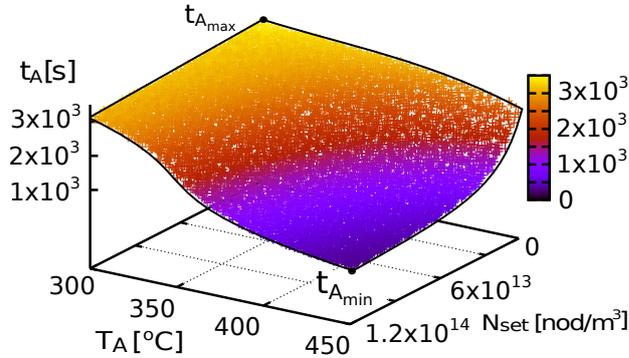


Figura 6.5: Diagrama de dispersión de la duración de la transformación ausferrítica en función de la temperatura de austemperizado y del conteo de nódulos de grafito.

La influencia que tienen las temperaturas del tratamiento térmico se puede observar en las figuras 6.6a y 6.6b. A medida que aumenta la temperatura de austenizado, la fracción de subunidades de ferrita disminuye; esto se debe al incremento de la concentración de carbono en la austenita al inicio de la transformación ausferrítica. Por otro lado, a medida que la temperatura de austemperizado aumenta, la fracción de subunidades de ferrita disminuye; esto se debe a que a mayor temperatura de austemperizado menor es la concentración de carbono en la austenita cuando la transformación ausferrítica se ha completado.

El efecto que produce el aumento de las concentraciones iniciales de molibdeno, de níquel, de cobre y de cromo es el aumento de la fracción de subunidades de ferrita. Este comportamiento se debe a cómo afectan estos elementos a la concentración de carbono en la austenita al comienzo y al final de la transformación ausferrítica.

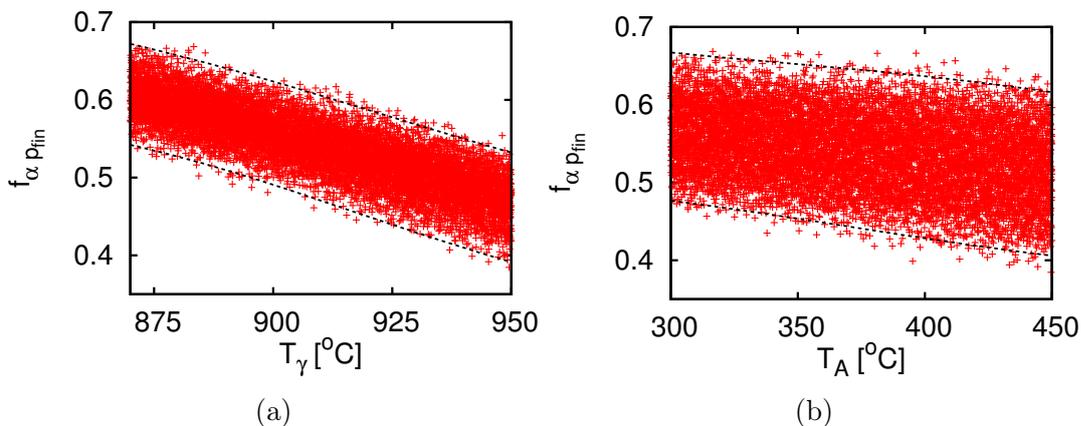


Figura 6.6: Diagrama de dispersión de la fracción en volumen de subunidades de ferrita al final del tratamiento térmico. Influencia de (a) la temperatura de austenizado y (b) la temperatura de austemperizado.

### 6.3. Estudio de sensibilidad del modelo

- *Fracción en volumen de austenita al final del tratamiento térmico:*

Como puede verse en la tabla 6.3 el factor que más influye en la fracción en volumen de austenita es la temperatura de austenizado. Le siguen en orden de importancia la temperatura de austemperizado y las concentraciones iniciales de molibdeno y de níquel. Elementos de aleación tales como el cromo y el cobre tienen una pequeña influencia. Todos los factores mencionados presentan muy poca interacción.

El efecto que tienen las temperaturas del tratamiento térmico se observa en las figuras 6.7a y 6.7b. A medida que aumenta la temperatura de austenizado, aumenta la fracción de austenita debido al incremento que se produce en la concentración de carbono en la austenita al inicio de la transformación ausferrítica. Por otro lado, a medida que aumenta la temperatura de austemperizado, la fracción analizada también aumenta, debido a que la concentración de carbono de la austenita al final de la transformación disminuye.

A medida que las concentraciones iniciales de cromo, de níquel, de cobre y de molibdeno aumentan, disminuye la fracción de austenita.

Es importante remarcar que la tendencia que tiene la fracción de austenita, en función de los factores aquí mencionados, es opuesta a la tendencia que tiene la fracción de subunidades de ferrita. Esto ocurre porque la austenita es consumida por las subunidades de ferrita durante la transformación ausferrítica; por lo tanto, si se forma una menor cantidad de ferrita, habrá una mayor cantidad de austenita a temperatura ambiente.

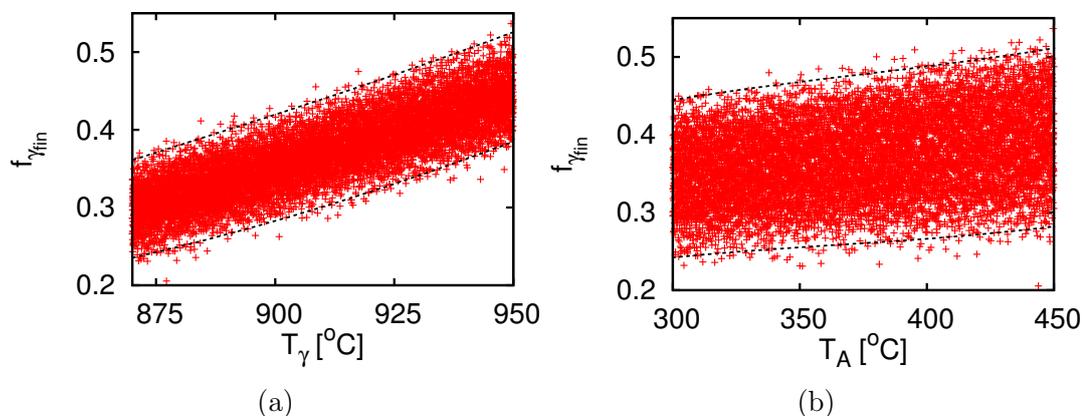


Figura 6.7: Diagrama de dispersión de la fracción en volumen de austenita al final del tratamiento térmico. Influencia de (a) la temperatura de austenizado y (b) la temperatura de austemperizado.

- *Variación de la longitud de la probeta al final del tratamiento térmico:*

Como puede verse en la tabla 6.3 el tipo de matriz inicial es el factor que más influye en la variación de la longitud de la probeta al final del tratamiento térmico. En una menor medida influyen la temperatura de austenizado y las concentraciones iniciales de níquel y de silicio. Debido a que sus índices de sensibilidad de primer orden y de efecto total son prácticamente iguales, los factores mencionados no interactúan. Los demás factores no influyen globalmente en la variación de la longitud, porque sus índices de efecto total son prácticamente nulos.

El efecto que tiene la matriz inicial se observa en la figura 6.8a. A medida que aumenta la fracción inicial de ferrita, disminuye el valor de la variación de la longitud. Según los resultados arrojados por las simulaciones, para una matriz inicial completamente ferrítica la probeta se contrae como consecuencia del tratamiento térmico, mientras que para una matriz completamente perlítica la probeta se expande. El efecto que tiene la temperatura de austenizado se observa en figura 6.8b. A medida que aumenta dicha temperatura, disminuye la variación de la longitud. Por otro lado, a medida que aumentan las concentraciones de silicio y de níquel también aumenta, pero levemente, la variación de la longitud de la probeta al final del tratamiento térmico.

La variación de la longitud de la probeta al final del tratamiento térmico, para el caso en estudio, depende de la densidad de la fundición al inicio y al final de dicho proceso. La densidad depende de las fases que constituyen el material. La densidad al inicio depende principalmente de las fracciones iniciales de grafito, de ferrita y de perlita; mientras que la densidad al final depende principalmente de las fracciones de fases obtenidas por el tratamiento (fracciones volumétricas de nódulos de grafito, de subunidades de ferrita y de austenita) que, según este estudio, dependen fundamentalmente de la temperatura de austenizado.

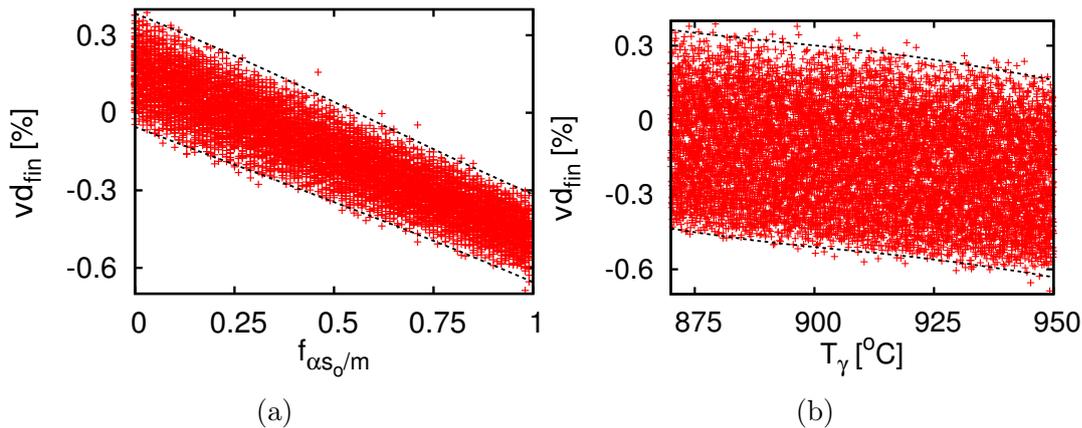


Figura 6.8: Diagrama de dispersión de la variación de la longitud de la probeta, al final del tratamiento térmico, respecto de su longitud inicial. Influencia de (a) el tipo de matriz inicial y (b) la temperatura de austenizado.

## Conclusiones

En base a los resultados obtenidos en el estudio de sensibilidad 1 se pueden extraer las siguientes conclusiones:

- Para cada una de las respuestas analizadas, se encontró al menos un factor con índice de efecto total mayor a 0,7, lo cual indica que la varianza de la respuesta depende fuertemente de la variación de ese factor. En la tabla 6.4 se puede ver el factor de mayor importancia de cada una de las respuestas analizadas.

### 6.3. Estudio de sensibilidad del modelo

- Para cada uno de los factores considerados, los índices de sensibilidad de efecto total han sido similares a los índices de sensibilidad de primer orden, indicando que no hay interacciones fuertes entre factores.
- La mayor interacción entre factores se encontró para el tiempo requerido para finalizar la transformación ausferrítica y es la que se produce entre los factores temperatura de austemperizado y conteo de nódulos de grafito.
- Para cada una de las respuestas analizadas se han encontrado una gran cantidad de factores con índice de efecto total nulo, indicando que, globalmente, la variación de esos factores no contribuye a la varianza de la respuesta del modelo.
- Los efectos de los factores considerados en este estudio se condicen con las observaciones experimentales reportadas en las distintas publicaciones analizadas en esta tesis. Sin embargo, el tiempo requerido para finalizar la transformación austerrítica resultó poco afectado por la variación de la composición química de la fundición; esto se debe a que los parámetros  $k_1$  y  $k_2$  del modelo de transformación ausferrítica, también tienen en cuenta la composición de la aleación y no fueron consideradas como factores en el estudio .

<b>Respuesta</b>	$t_\gamma$	$t_A$	$f_{\alpha p_{fin}}$	$f_{\gamma_{fin}}$	$vd_{fin}$
<b>Factor</b>	$N_{set}$	$T_A$	$T_\gamma$	$T_\gamma$	$f_{\alpha s_o/m}$

Tabla 6.4: Factor de mayor influencia para cada una de las respuestas analizadas en el estudio de sensibilidad 1.

#### 6.3.2. Estudio de sensibilidad 2

Este estudio tiene como objetivo analizar la respuesta del modelo propuesto en la simulación de un tratamiento térmico de austemperizado con austenizado completo. Los factores considerados son los siguientes:

- Composición química de la fundición de hierro nodular.
- Microestructura inicial: fracción en volumen de ferrita respecto del volumen de la matriz ( $f_{\alpha s_o/m}$ ), conteo de nódulos de grafito y espaciado interlaminar de perlita.
- Tiempo de austemperizado: de esta forma la transformación ausferrítica puede desarrollarse, o no, por completo. Cuando esta transformación no se desarrolla por completo, es posible que la austenita se transforme en martensita durante el enfriamiento desde la temperatura de austemperizado hasta la temperatura ambiente.
- Temperaturas de austenizado y austemperizado.

## Capítulo 6. Estudio de sensibilidad del modelo TMM

Las respuestas del modelo analizadas en este estudio se presentan a continuación y se señalan en el esquema de la figura 6.9:

- Fracción volumétrica de subunidades de ferrita al final del tratamiento térmico ( $f_{\alpha p_{fin}}$ ).
- Fracción volumétrica de austenita al final del tratamiento térmico ( $f_{\gamma_{fin}}$ ).
- Fracción volumétrica de martensita al final del tratamiento térmico ( $f_{m_{fin}}$ ).
- Variación de la longitud de la probeta al final del tratamiento térmico respecto de la longitud inicial ( $vd_{fin}$ ). Esta variación se define como el cociente entre el desplazamiento del extremo no restringido de la probeta, al final del tratamiento térmico, y la longitud inicial de la probeta ( $vd_{fin} = \Delta l_{fin}/l_o$ ).

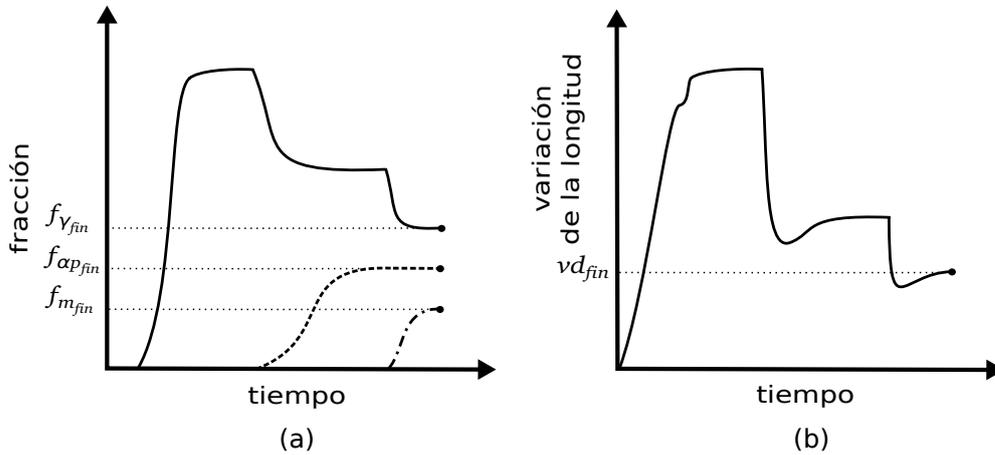


Figura 6.9: Respuestas del modelo analizadas en el estudio de sensibilidad 2.

El número total de factores es  $k = 13$  y en la tabla 6.5 se muestran los valores máximos y mínimos que pueden tomar cada uno de ellos, los cuales fueron determinados teniendo en cuenta los valores que generalmente se utilizan en los ensayos experimentales reportados en la literatura. Para obtener la solución numérica de los índices de sensibilidad se utiliza una base de ejemplares igual a  $N = 10000$ .

### 6.3. Estudio de sensibilidad del modelo

<b>i</b>	<b>Factor</b>	<b>f<sub>min<sub>i</sub></sub></b>	<b>f<sub>max<sub>i</sub></sub></b>
1	<i>C</i>	3,3	3,8
2	<i>Si</i>	2,5	3,5
3	<i>Mn</i>	0,25	0,5
4	<i>Cr</i>	0	0,04
5	<i>Ni</i>	0,5	3,5
6	<i>Cu</i>	0,5	1
7	<i>Mo</i>	0	0,3
8	<i>f<sub>aso/m</sub></i>	0	1
9	<i>N<sub>set</sub></i>	8x10 <sup>12</sup>	1,18x10 <sup>14</sup>
10	<i>ips</i>	0,5x10 <sup>-6</sup>	0,5x10 <sup>-5</sup>
11	<i>T<sub>γ</sub></i>	870	950
12	<i>T<sub>A</sub></i>	300	450
13	<i>t<sub>A</sub></i>	20	5600

Tabla 6.5: Factores considerados para el estudio de sensibilidad 2. La composición química se encuentra en %*peso*, el conteo de nódulos de grafito en *nod/m<sup>3</sup>*, el espaciado interlaminar de la perlita en *m*, las temperaturas de austenizado y austemperizado en °*C* y el tiempo de austemperizado en *s*.

#### Análisis de los resultados

En las tablas 6.6 y 6.7 se presentan los índices de sensibilidad de primer orden y de efecto total, respectivamente. Debido al método numérico empleado para calcular los índices de sensibilidad, algunos tuvieron un valor negativo muy próximo a cero. En tales casos estos índices fueron redondeados a cero, tal como se propone en la referencia [Saltelli et al., 2008], y se representan en la tabla como  $-0,0$ .

A continuación se analiza cómo afecta cada uno de los factores considerados a las respuestas analizadas, diferenciando lo ocurrido cuando la transformación ausferrítica se desarrolló, o no, por completo. En los diagramas de dispersión presentados se identifican dos regiones. La región 1 contiene las respuestas del modelo de los casos en los que la transformación ausferrítica al final del tratamiento es completa; mientras que la región 2 contiene las respuestas del modelo de los casos en los que la transformación ausferrítica al final del tratamiento es incompleta.

Capítulo 6. Estudio de sensibilidad del modelo TMM

i	Factor	S <sub>i</sub>			
		$f_{\alpha p_{fin}}$	$f_{\gamma_{fin}}$	$f_{m_{fin}}$	$vd_{fin}$
1	<i>C</i>	-0,0	0,0	-0,0	0,0
2	<i>Si</i>	-0,0	0,0	-0,0	0,01
3	<i>Mn</i>	-0,0	0,0	-0,0	-0,0
4	<i>Cr</i>	0,0	0,0	-0,0	-0,0
5	<i>Ni</i>	0,01	0,01	-0,0	0,04
6	<i>Cu</i>	0,0	0,0	-0,0	0,0
7	<i>Mo</i>	0,03	0,03	-0,0	0,0
8	$f_{\alpha_{so}/m}$	-0,0	-0,0	-0,0	<b>0,61</b>
9	$N_{set}$	0,01	0,01	0,01	0,0
10	<i>ips</i>	-0,0	-0,0	-0,0	-0,0
11	$T_{\gamma}$	0,22	0,23	-0,0	0,04
12	$T_A$	-0,0	0,04	0,01	0,01
13	$t_A$	<b>0,55</b>	<b>0,43</b>	<b>0,76</b>	0,19

Tabla 6.6: Índices de sensibilidad de primer orden para cada una de las respuestas analizadas en el estudio de sensibilidad 2.

i	Factor	S <sub>Ti</sub>			
		$f_{\alpha p_{fin}}$	$f_{\gamma_{fin}}$	$f_{m_{fin}}$	$vd_{fin}$
1	<i>C</i>	-0,0	-0,0	0,01	-0,0
2	<i>Si</i>	-0,0	0,01	0,02	0,02
3	<i>Mn</i>	-0,0	-0,0	0,0	-0,0
4	<i>Cr</i>	0,0	-0,0	0,0	0,0
5	<i>Ni</i>	0,01	0,05	0,01	0,05
6	<i>Cu</i>	0,0	-0,0	0,0	0,0
7	<i>Mo</i>	0,03	0,02	0,0	0,0
8	$f_{\alpha_{so}/m}$	-0,0	-0,0	0,0	<b>0,61</b>
9	$N_{set}$	0,03	0,10	0,10	0,04
10	<i>ips</i>	-0,0	-0,0	0,0	-0,0
11	$T_{\gamma}$	0,23	0,23	0,01	0,05
12	$T_A$	0,10	0,21	0,18	0,07
13	$t_A$	<b>0,70</b>	<b>0,65</b>	<b>0,98</b>	0,27

Tabla 6.7: Índices de sensibilidad de efecto total para cada una de las respuestas analizadas en el estudio de sensibilidad 2.

- *Fracción en volumen de subunidades de ferrita al final del tratamiento térmico:*

Como puede verse en la tabla 6.7 el factor que más influye en la fracción en volumen de subunidades de ferrita es el tiempo de austemperizado. Le siguen en orden de importancia las temperaturas de austenizado y austemperizado, el conteo de nódulos de grafito y las concentraciones iniciales de molibdeno y de níquel. De los factores mencionados, el tiempo y la temperatura de austemperizado interactúan entre sí con

### 6.3. Estudio de sensibilidad del modelo

un índice de sensibilidad de segundo orden  $S_{12-13} \cong 0,10$ . El conteo de nódulos de grafito y la temperatura de austenizado interactúan levemente con otros factores. Los factores restantes no influyen globalmente en la fracción de subunidades de ferrita final.

El efecto del tiempo de austemperizado se observa en la figura 6.10a. En la región 1 se ubican las fracciones de subunidades obtenidas en las distintas simulaciones cuando la transformación ausferrítica al final del tratamiento es completa; mientras que en la región 2 se encuentran las fracciones de esta fase obtenidas para tiempos de austemperizados inferiores al necesario para completar la transformación ausferrítica. Se observa que a medida que aumenta el tiempo de austemperizado, aumenta la fracción final de subunidades de ferrita.

La influencia del conteo de nódulos de grafito se observa en la figura 6.10b. En los tratamientos en los que la transformación ausferrítica es completa (región 1) el conteo de nódulos no influye en la fracción final de subunidades de ferrita. Por otro lado, en la región 2 se observa que a medida que el conteo de nódulos aumenta, disminuye el número de simulaciones en las cuales la transformación ausferrítica es incompleta. Este comportamiento está relacionado con el incremento de la velocidad de la transformación ausferrítica a medida que aumenta el conteo de nódulos de grafito, debido a una mayor contribución de la formación de subunidades de ferrita en la superficie de los nódulos de grafito, la cual es más rápida que la formación de subunidades de ferrita en las puntas de las subunidades existentes.

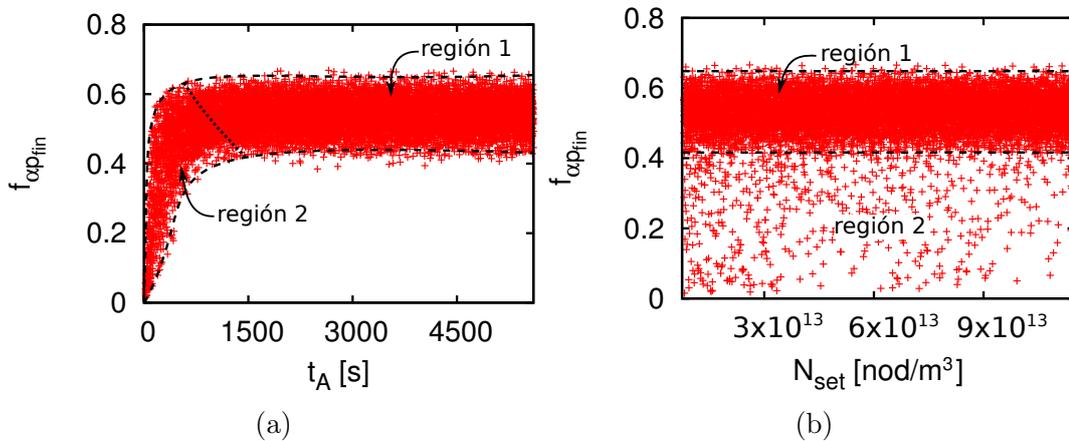


Figura 6.10: Diagrama de dispersión de la fracción en volumen de subunidades de ferrita al final de tratamiento térmico. Influencia de (a) el tiempo de austemperizado y (b) el conteo de nódulos de grafito.

El efecto de las temperaturas del tratamiento térmico se observa en las figuras 6.11a y 6.11b. Teniendo en cuenta los casos en los que la transformación ausferrítica se completa (región 1) el comportamiento es el mismo que el encontrado en el estudio de sensibilidad 1: disminución de la fracción de subunidades a medida que aumentan las temperaturas de austenizado y de austemperizado. La temperatura de austenizado no manifiesta una gran influencia en la región 2; en cambio, si se analiza la temperatura de austemperizado se observa que a medida que ésta aumenta, disminuye el número de

simulaciones en las cuales la transformación ausferrítica no se completa, debiéndose esto al incremento de la velocidad de la transformación ausferrítica a medida que aumenta la temperatura de austemperizado, como consecuencia de que las subunidades de ferrita tienen un mayor tamaño y un menor tiempo de incubación.

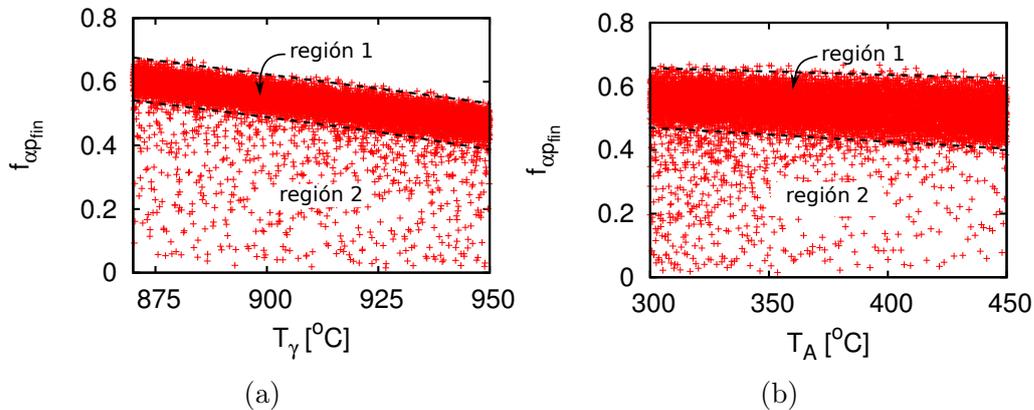


Figura 6.11: Diagrama de dispersión de la fracción en volumen de subunidades de ferrita al final de tratamiento térmico. Influencia de (a) la temperatura de austenizado y (b) la temperatura de austemperizado.

La influencia de las concentraciones iniciales de molibdeno y de níquel, en los casos de la región 1, es la misma que la encontrada en el estudio de sensibilidad 1: a medida que aumentan las concentraciones de los mencionados elementos, aumenta la fracción final de subunidades de ferrita. No se observan influencias de estos elementos de aleación cuando la transformación ausferrítica no se desarrolla por completo.

- *Fracción en volumen de austenita al final del tratamiento térmico:*

Como puede verse en la tabla 6.7 el factor que más influye en la fracción en volumen de austenita es el tiempo de austemperizado. Le siguen en orden de importancia las temperaturas de austenizado y de austemperizado, el conteo de nódulos de grafito y las concentraciones iniciales de níquel, de molibdeno y de silicio. El tiempo de austemperizado interactúa con la temperatura de austemperizado y con el conteo de nódulos de grafito. El resto de los factores prácticamente no influyen en la fracción volumétrica de austenita.

El efecto del tiempo de austemperizado puede ser observado en la figura 6.12a. Para tiempos de austemperizado muy cortos la fracción final de austenita es próxima a cero. A medida que el tiempo total de austemperizado del tratamiento aumenta, la fracción final de austenita también aumenta hasta llegar a un máximo, a partir del cual disminuye hasta estabilizarse en un valor dado. El comportamiento observado se debe a que cuando el tiempo de austemperizado es pequeño, la concentración de carbono alcanzada en la austenita durante la transformación ausferrítica es baja, motivo por el cual dicha fase se transforma casi por completo en martensita cuando disminuye la temperatura. La máxima fracción de austenita se obtiene cuando la concentración de carbono de esta fase es lo suficientemente elevada como para evitar que se forme la

### 6.3. Estudio de sensibilidad del modelo

martensita, sin que haya finalizado la transformación ausferrítica. La disminución de la fracción final de austenita, luego de su máximo, se debe a un mayor avance de la transformación ausferrítica. Globalmente la fracción de austenita se estabiliza a partir de un tiempo  $t_A \cong 2500s$ , debido a que en ese tiempo la transformación ausferrítica ya finalizó. En la tabla 6.8 se encuentran los valores de los factores que definen los límites 1 y 2 en la figura 6.12a.

Límite	Factores		
	$T_A$ [ $^{\circ}C$ ]	$N_{set}$ [ $nod/m^3$ ]	$T_{\gamma}$ [ $^{\circ}C$ ]
1	450	$1,18 \times 10^{14}$	950
2	300	$8 \times 10^{12}$	870

Tabla 6.8: Valores de los factores más influyentes que determinan los límites 1 y 2 en la figura 6.12a.

La influencia de las temperaturas del tratamiento térmico se observa en las figuras 6.12b y 6.12c. Teniendo en cuenta los casos en los que la transformación ausferrítica se completa (región 1), a medida que aumentan las temperaturas de austenizado y de austemperizado, aumenta la fracción final de austenita. Este comportamiento es igual al observado en el estudio de sensibilidad 1. Cuando la transformación ausferrítica no es completa (región 2), a medida que aumenta la temperatura de austenizado disminuye levemente el número de simulaciones en las cuales la fracción de austenita es próxima a cero, debiéndose esto a la disminución de la temperatura de comienzo de transformación martensítica, que evita que una gran cantidad de austenita se transforme en martensita. Por otro lado, cuanto la temperatura de austemperizado aumenta, disminuye el número de simulaciones en las cuales la fracción de austenita está en la región 2. Este efecto se debe a un aumento de la velocidad de la transformación ausferrítica, que le permite a la austenita adquirir rápidamente la concentración de carbono necesaria para estabilizarse.

El efecto del conteo de nódulos de grafito se manifiesta cuando la transformación ausferrítica no se desarrolla por completo, ver región 2 de la figura 6.13a, disminuyendo la cantidad de simulaciones en las cuales la fracción de austenita se encuentra en dicha región a medida que aumenta el conteo de nódulos. El efecto observado ocurre porque el aumento del conteo de nódulos produce un incremento de la velocidad de la transformación ausferrítica.

El efecto de las concentraciones iniciales de níquel, de molibdeno y de silicio se observa principalmente en los casos en que la transformación ausferrítica es completa. A medida que aumentan las concentraciones de estos elementos de aleación, disminuye la fracción de austenita, como se observa para el níquel en la figura 6.13b.

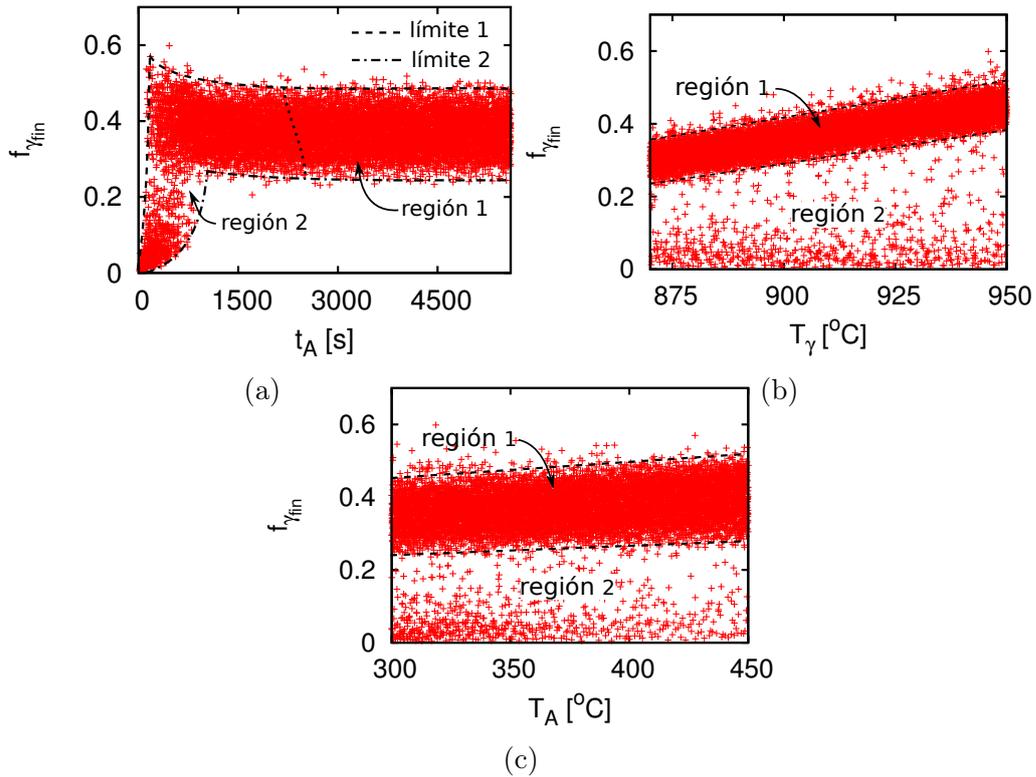


Figura 6.12: Diagrama de dispersión de la fracción en volumen de austenita al final de tratamiento térmico. Influencia de (a) el tiempo de austemperizado, (b) la temperatura de austemperizado y (c) la temperatura de austemperizado.

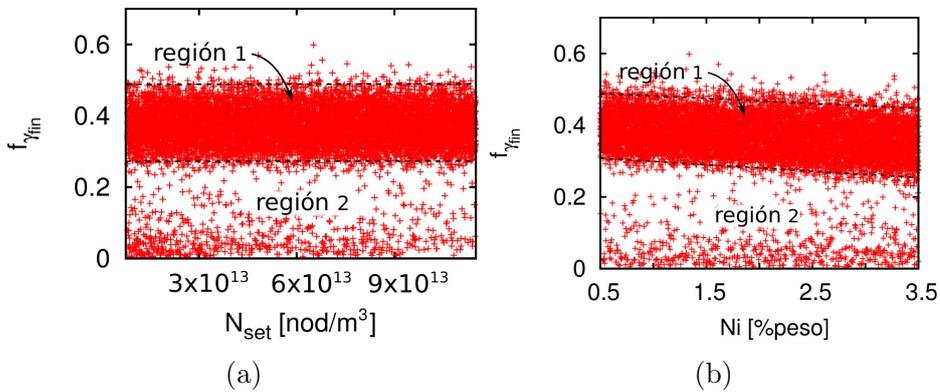


Figura 6.13: Diagrama de dispersión de la fracción en volumen de austenita al final de tratamiento térmico. Influencia de (a) los nódulos de grafito y (b) la concentración inicial de níquel.

• *Fracción en volumen de martensita al final del tratamiento térmico:*

Como puede verse en la tabla 6.7 el factor que más influye en la fracción en volumen de martensita es el tiempo de austemperizado. Le siguen en orden de importancia la temperatura de austemperizado y el conteo de nódulos de grafito. Los factores restantes no influyen globalmente, por lo que sus índices de efecto total son prácticamente nulos.

### 6.3. Estudio de sensibilidad del modelo

De los factores que influyen en la fracción de martensita, salvo el tiempo de austemperizado, los restantes tienen un índice de sensibilidad de primer orden prácticamente nulo, indicando que la temperatura de austemperizado y el conteo de nódulos de grafito afectan a dicha fracción a través de la interacción que presentan con el tiempo de austemperizado.

El efecto que tiene el tiempo de austemperizado se observa en la figura 6.14. Cuando el tiempo de austemperizado es pequeño prácticamente toda la austenita se transforma en martensita. A medida que el tiempo aumenta, la fracción de martensita disminuye hasta anularse. El modelo considera que la cantidad de martensita formada disminuye a medida que la temperatura de comienzo de la transformación martensítica también lo hace (ver ecuaciones 5.86 y 5.87). Dicha temperatura disminuye con el aumento de la concentración de carbono en la austenita, la cual a su vez aumenta al formarse una mayor fracción de subunidades de ferrita. En la tabla 6.9 se encuentran los valores de la temperatura de austemperizado y del conteo de nódulos de grafito que definen los límites 1 y 2 en la figura 6.14.

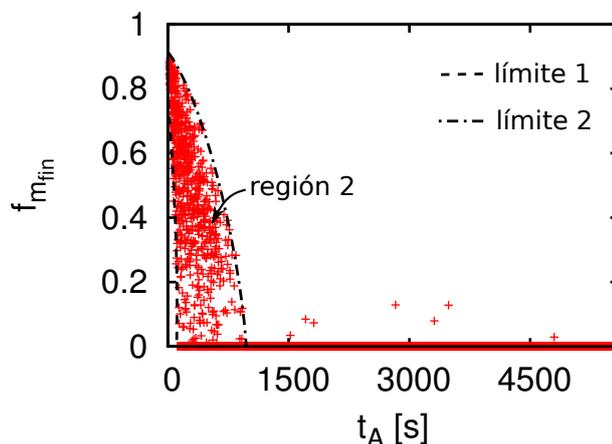


Figura 6.14: Diagrama de dispersión de la fracción en volumen de martensita, al final del tratamiento térmico, en función del tiempo de austemperizado.

Límite	Factores	
	$T_A$ [ $^{\circ}C$ ]	$N_{set}$ [ $nod/m^3$ ]
1	450	$1,18 \times 10^{14}$
2	300	$8 \times 10^{12}$

Tabla 6.9: Valores de los factores más influyentes que determinan los límites 1 y 2 en la figura 6.14.

En la figura 6.15 se muestra la fracción volumétrica de martensita en función de: (a) temperatura de austemperizado y tiempo de austemperizado y (b) del conteo de nódulos de grafito y tiempo de austemperizado. Se observa que al aumentar la temperatura de austemperizado y el conteo de nódulos de grafito, disminuye el tiempo de austemperizado mínimo requerido para evitar la formación de martensita. Este

comportamiento del modelo se debe a la gran influencia que tienen estos dos factores en la cinética de la transformación ausferrítica, como se mencionó anteriormente.

La temperatura de austenizado influye mayormente en la fracción de martensita cuando el tiempo de austemperizado tiende a cero, de manera tal que al aumentar la temperatura, aumenta levemente la fracción final de martensita. Este efecto se debe a una mayor cantidad de austenita formada a medida que la temperatura de austenizado aumenta.

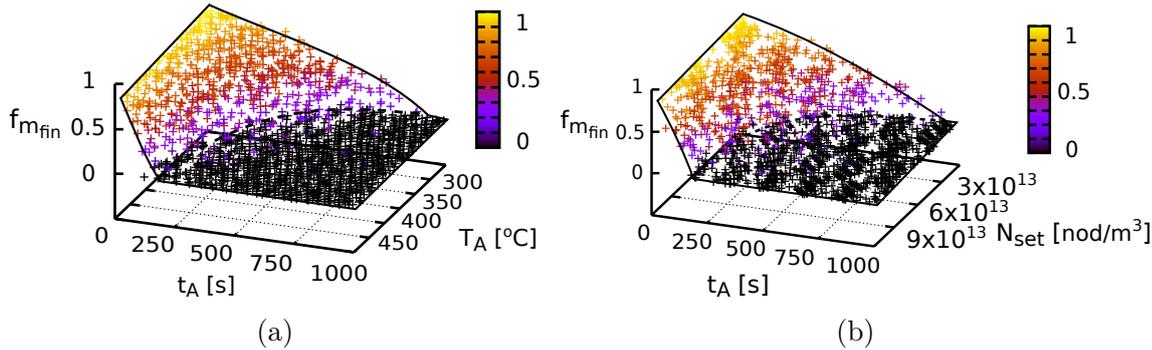


Figura 6.15: Diagrama de dispersión de la fracción en volumen martensita al final de tratamiento térmico. Influencia de (a) el tiempo y la temperatura de austemperizado y (b) el tiempo de austemperizado y el conteo de nódulos de grafito.

- *Variación de la longitud de la probeta al final del tratamiento térmico:*

Como puede verse en la tabla 6.7, el tipo de matriz inicial es el factor que más influye en la variación de la longitud de la probeta al final del tratamiento térmico. Le siguen en orden de importancia el tiempo de austemperizado, las temperaturas de austemperizado y austenizado, el conteo de nódulos de grafito y las concentraciones iniciales de níquel y de silicio. El tipo de matriz sólo tiene efecto de primer orden, mientras que el tiempo y la temperatura de austemperizado son los que presentan mayores valores de índices de sensibilidad de alto orden.

La influencia del tipo de matriz inicial se observa en la figura 6.16a. A medida que aumenta la fracción inicial de ferrita, disminuye la variación de la longitud en ambas regiones asociadas al estado de la transformación ausferrítica. Las variaciones agrupadas en la región 1 son iguales a las observadas en la figura 6.8a del estudio de sensibilidad 1, porque en ambos casos la transformación ausferrítica finalizó. Por otro lado, el límite superior de la región 2 corresponde a una matriz final completamente martensítica.

El efecto del tiempo de austemperizado se observa en la figura 6.16b, en la cual también es posible identificar las dos regiones asociadas al estado final de la transformación ausferrítica. En la región 2, a medida que el tiempo de austemperizado aumenta, la variación de la longitud disminuye, porque la matriz final deja de ser martensítica para convertirse en una completamente ausferrítica. En la región 1 la variación de la longitud no depende del tiempo de austemperizado porque la transformación ausferrítica es completa. La gran dispersión observada en la región 1 se debe, principalmente, a la influencia del tipo de matriz inicial. En la tabla 6.10 se

presentan los valores de la fracción volumétrica inicial de ferrita (normalizada respecto del volumen de la matriz) y de las temperaturas de austenizado y de austemperizado que definen los límites 1 y 2 de la figura 6.16b.

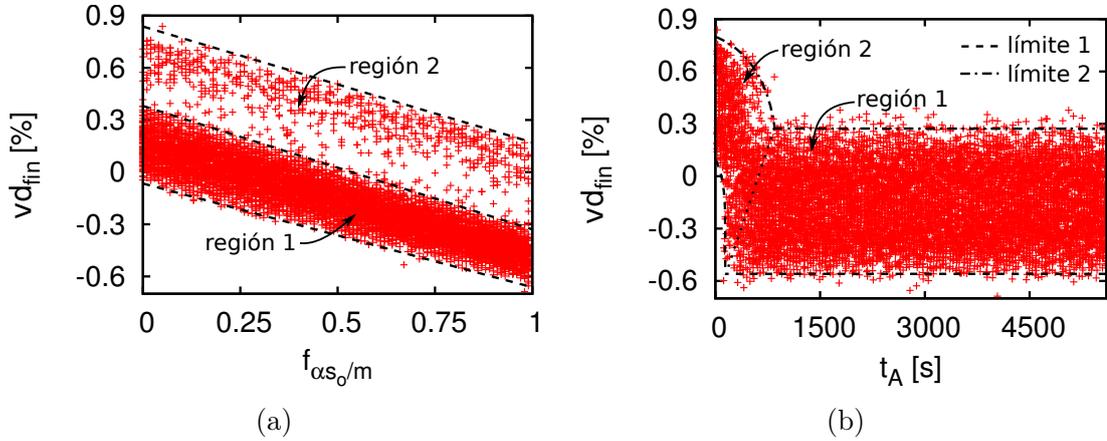


Figura 6.16: Diagrama de dispersión de la variación de la longitud de la probeta, al final del tratamiento térmico, respecto de su longitud inicial. Influencia de (a) el tipo de matriz inicial y (b) el tiempo de austemperizado.

Límite	Factores		
	$f_{\alpha_{s_o}/m}$	$T_A$ [°C]	$T_\gamma$ [°C]
1	1	450	950
2	0	300	870

Tabla 6.10: Valores de los factores más influyentes que determinan los límites 1 y 2 en la figura 6.16b.

El efecto de la temperatura de austenizado se observa en la figura 6.17a. En la región 1, a medida que aumenta la temperatura disminuye la variación final de la longitud. Este comportamiento es igual al observado en la figura 6.8b del estudio de sensibilidad 1. En la región 2 el comportamiento es el siguiente: a medida que aumenta la temperatura de austenizado, aumenta la variación de la longitud cuando la matriz final es completamente martensítica (límite superior de la región 2). A medida que la matriz comienza a tener menor cantidad de martensita, el efecto de la temperatura cambia hasta convertirse en el opuesto, como se observa en el límite entre ambas regiones.

El efecto de la temperatura de austemperizado se observa en la figura 6.17b. Cuando la transformación ausferrítica es completa (región 1), a medida que aumenta la temperatura, disminuye levemente la variación de la longitud. Por otro lado, en los casos en los que la transformación ausferrítica no se completó, a medida que la temperatura aumenta, disminuye la cantidad de simulaciones en las cuales la variación de la longitud se encuentra en la región 2; debiéndose este comportamiento a la relación que existe entre la temperatura de austemperizado y la velocidad de la transformación ausferrítica.

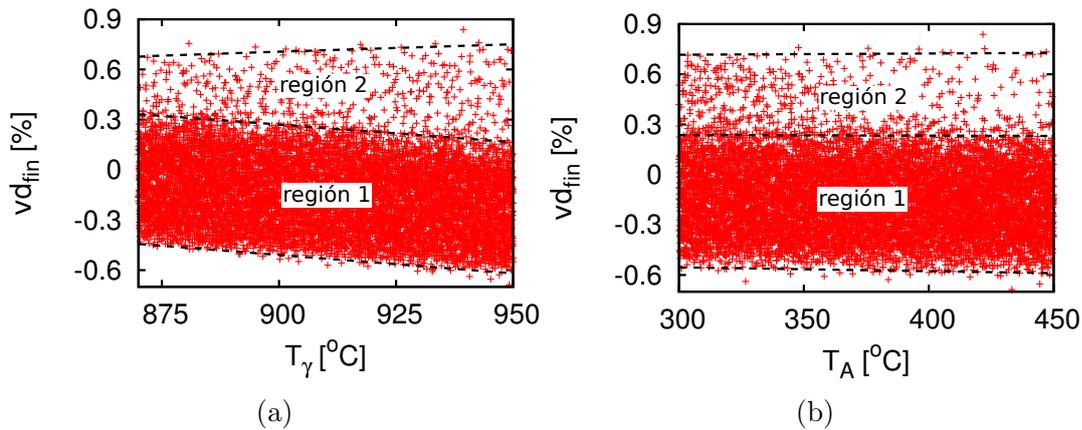


Figura 6.17: Diagrama de dispersión de la variación de la longitud de la probeta, al final del tratamiento térmico, respecto de su longitud inicial. Influencia de (a) la temperatura de austenizado y (b) la temperatura de austemperizado.

En la figura 6.18a es posible observar el efecto que tiene la interacción entre el tiempo y la temperatura de austemperizado. El tiempo mínimo necesario para que la variación final de la longitud esté dentro de la región 1, depende de la temperatura de austemperizado de la siguiente manera: a medida que aumenta la temperatura, disminuye el tiempo mínimo (línea de trazo). Este comportamiento se debe a la relación que existe entre la velocidad de la transformación ausferrítica y la temperatura de austemperizado.

El conteo de nódulos de grafito afecta a la variación de la longitud cuando la transformación ausferrítica no se completa (región 2), como se observa en la figura 6.18b. Este comportamiento se debe a la relación que existe entre la velocidad de la transformación ausferrítica y el conteo de nódulos de grafito.

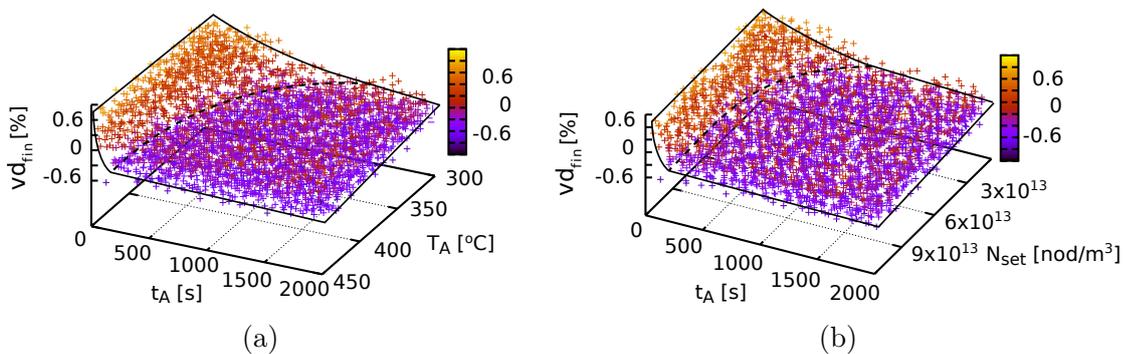


Figura 6.18: Diagrama de dispersión de la variación de la longitud de la probeta, al final del tratamiento térmico, respecto de su longitud inicial. Influencia de (a) el tiempo y la temperatura de austemperizado y (b) el tiempo de austemperizado y el conteo de nódulos de grafito.

La variación de la longitud de la probeta al final del tratamiento térmico, para el caso en estudio, depende de la densidad de la fundición al inicio y al final de dicho proceso. La densidad depende de las fases que constituyen el material. La densidad al inicio depende de las fracciones iniciales de grafito, de ferrita y de perlita; mientras que la densidad al final depende de las fracciones de fases obtenidas por el tratamiento

### 6.3. Estudio de sensibilidad del modelo

(fracciones volumétricas de nódulos de grafito, de subunidades de ferrita, de austenita y de martensita) que, según este estudio, dependen fundamentalmente del tiempo y de la temperatura de austemperizado.

#### Conclusiones

En base a los resultados obtenidos en el estudio de sensibilidad 2 se puede llegar a las siguientes conclusiones:

- Para cada una de las respuestas analizadas se encontró al menos un factor con índice de efecto total mayor a 0,6 lo cual manifiesta que la varianza de la respuesta depende fuertemente de la variación de ese factor. El tiempo de austemperizado es un factor que influye fuertemente en la mayoría de las respuestas analizadas, indicando la importancia que tiene su correcta elección a la hora de realizar el tratamiento térmico. En la tabla 6.11 se pueden ver los factores de mayor importancia de cada una de las respuestas analizadas.
- Para factores tales como la composición química inicial, el tipo de matriz inicial, el espaciado interlaminar y la temperatura de austenizado, los índices de efecto total han sido similares a los índices de sensibilidad de primer orden. Esto indica que globalmente estos factores no presentan una fuerte interacción.
- El tiempo de austemperizado presenta interacciones con la temperatura de austemperizado y con el conteo de nódulos de grafito, debiéndose a que estos últimos influyen en la cinética del cambio de fase y por lo tanto en la velocidad de la transformación ausferrítica.
- Para cada una de las respuestas analizadas se han encontrado una gran cantidad de factores con índice de efecto total nulo, indicando que, globalmente, la variación de esos factores no contribuye a la varianza de la respuesta del modelo.
- Los efectos de los factores considerados en este estudio se condicen con las observaciones experimentales reportadas en las distintas publicaciones analizadas en esta tesis. Sin embargo, la cinética de la transformación ausferrítica resultó poco afectada por la variación de la composición química de la fundición; esto se debe a que los parámetros  $k_1$  y  $k_2$  del modelo de transformación ausferrítica, también tienen en cuenta la composición de la aleación y no fueron consideradas como factores en el estudio.

Respuesta	$f_{\alpha p_{fin}}$	$f_{\gamma_{fin}}$	$f_{m_{fin}}$	$vd_{fin}$
Factor	$t_A$	$t_A$	$t_A$	$f_{\alpha s_o/m}$

Tabla 6.11: Factor de mayor influencia para cada una de las respuestas analizadas en el estudio de sensibilidad 2.



# Capítulo 7

## Aplicación del modelo termomecánico-metalúrgico

### 7.1. Introducción

En este Capítulo se presentan simulaciones computacionales del tratamiento térmico de austemperizado realizadas con el modelo termomecánico-metalúrgico propuesto en esta tesis. Por un lado se simulan dos tratamientos térmicos realizados en laboratorio sobre probetas de pequeñas dimensiones que permiten validar aspectos importantes del modelo. Por otro lado se presenta el estudio computacional del tratamiento térmico de una pieza de aplicación automotriz. Este estudio permite visualizar las posibilidades del modelo para representar casos reales en los que los tamaños y las geometrías complejas pueden ocasionar evoluciones de la temperatura y de la microestructura diferentes en los distintos puntos de la pieza.

### 7.2. Simulación de ensayos experimentales

El modelo propuesto se utiliza para simular ensayos experimentales del tratamiento térmico de austemperizado de una fundición de hierro nodular. Las probetas tratadas térmicamente son de pequeñas dimensiones, permitiendo que las evoluciones de la temperatura y de las fracciones de fase sean prácticamente homogéneas en todo su volumen. Se observó que estas probetas no contienen productos de la transformación eutectoide (ferrita y perlita) evidenciando que la velocidad de enfriamiento desde la temperatura de austenizado hasta la de austemperizado, superó la velocidad crítica en todos los puntos. Este aspecto es de fundamental importancia ya que el modelo metalúrgico propuesto asume que el enfriamiento se desarrollará de manera tal de evitar la transformación eutectoide.

Los ensayos experimentales simulados son clasificados en:

- Ensayos con austemperizado completo: las probetas son tratadas térmicamente

empleando un tiempo de austemperizado suficientemente prolongado como para obtener una matriz final completamente ausferrítica.

- Ensayos con distintos tiempos de austemperizado: las probetas son tratadas térmicamente variando el tiempo de austemperizado, obteniéndose distintos tipos de matrices finales.

### 7.2.1. Ensayos con austemperizado completo

Los ensayos experimentales simulados son los presentados en los trabajos de Fraś *et al.* y Boccardo *et al.* [Fraś *et al.*, 2012, Boccardo *et al.*, 2016], todos ellos realizados en el mismo laboratorio (Department of Engineering of Cast Alloys and Composites, Faculty of Foundry Engineering, AGH University of Science and Technology, Krakow, Poland). En estos ensayos el tiempo de austemperizado es lo suficientemente prolongado como para obtener una matriz completamente ausferrítica al final del tratamiento térmico.

Las probetas fueron obtenidas de una pieza con secciones de distinto espesor, motivo por el cual se cuenta con distintos conteos de nódulos de grafito y distintos tipos de matrices al inicio del tratamiento térmico, como se muestra en la tabla 7.1. La composición química de la fundición de hierro nodular empleada es  $3,7C - 2,7Si - 0,1Mn - 0,02P - 0,01S - 0,03Mg$  (en %*peso*).

Se cuenta con los resultados de seis ensayos, cada uno de ellos con una combinación distinta de microestructura inicial y temperaturas de tratamiento térmico, permitiendo, de esta forma, validar el modelo para una variada combinación de parámetros de entrada. Las probetas tratadas son pequeñas y de geometría cilíndrica. Se utilizan dos tamaños de probeta, *G1*: 2,5mm de diámetro y 40mm de largo y *G2*: 1,5mm de diámetro y 20mm de largo. En la tabla 7.2 se presentan el tipo de fundición nodular (material), el tipo de probeta, y las temperaturas y los tiempos de austenizado y austemperizado de cada uno de los ensayos.

Material	Conteo de nódulos de grafito [ <i>nod/mm</i> <sup>2</sup> ]	Fracción de grafito [ <i>vol</i> ]	Fracción de ferrita [ <i>vol</i> ]	Fracción de perlita [ <i>vol</i> ]
M1	140	0.11	0.42	0.47
M2	330	0.12	0.78	0.1
M3	840	0.11	0.46	0.43
M4	1992	0.1	0.1	0.8

Tabla 7.1: Microestructuras iniciales de las probetas utilizadas en los ensayos de austemperizado completo.

## 7.2. Simulación de ensayos experimentales

Ensayo	Material	Tipo de probeta	$T_\gamma$ [ $^{\circ}C$ ]	$T_A$ [ $^{\circ}C$ ]	$t_\gamma$ [min]	$t_A$ [min]
NC1	M1	G1	900	400	40	33
NC2	M2	G2	920	400	30	33
NC3	M3	G1	900	400	40	33
NC4T1	M4	G2	920	400	30	33
T2	M4	G2	920	350	30	33
T3	M4	G2	920	300	30	33

Tabla 7.2: Configuraciones de los ensayos con austemperizado completo.

### Modelado

La geometría de las probetas se modela considerando la simetría axial y el plano de simetría perpendicular a su eje, estando posicionado este plano en la mitad de la longitud de la probeta, ver figura 7.1.

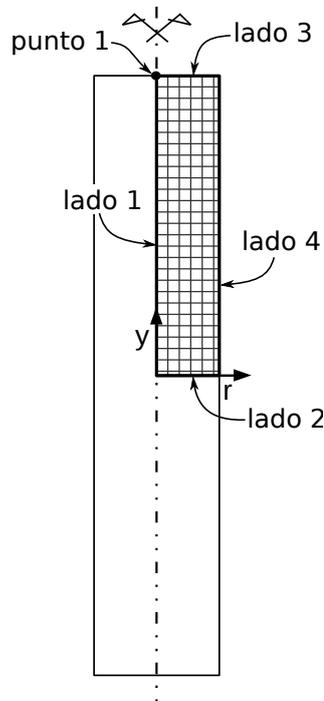


Figura 7.1: Discretización de la geometría modelada para simular los ensayos con austemperizado completo.

Para aplicar las condiciones de simetría en el problema mecánico, se restringe adecuadamente el desplazamiento radial en el lado 1 y el desplazamiento axial en el lado 2. Para aplicar las condiciones de simetría en el problema térmico, se hace cero el flujo de calor normal a los lados 1 y 2; mientras que para modelar el intercambio de calor entre la probeta y el medio ambiente por convección-radiación se aplican las condiciones de borde adecuadas en los lados 3 y 4. Las mallas de elementos

## Capítulo 7. Aplicación del modelo TMM

finitos utilizadas para los problemas térmico y mecánico cuentan con 600 elementos rectangulares axisimétricos de 4 nodos. El número de elementos se determinó realizando un estudio de la convergencia de los resultados para ambos problemas.

Las propiedades térmicas y mecánicas de la fundición de hierro nodular se muestran en las tablas A.1 y A.2 del Apéndice A. El coeficiente de transferencia de calor por convección-radiación entre la probeta y el medio ambiente es  $h = 70J/(sm^2 \text{ } ^\circ C)$  durante todo el calentamiento y durante el enfriamiento desde la temperatura de austemperizado hasta la ambiente; mientras que es igual a  $h = 400J/(sm^2 \text{ } ^\circ C)$  durante el enfriamiento desde la temperatura de austenizado hasta la de austemperizado.

Con respecto al modelo metalúrgico, los nódulos de grafito y las colonias de perlita son agrupadas en una única familia ( $nfamg = 1$  y  $nfamc = 1$ ). El espaciado interlaminar de la perlita no fue medido experimentalmente; tal como se observó en el Capítulo 6, esta variable no influye sustancialmente en el proceso de austenizado. En esta simulación se optó por una perlita gruesa de  $ips_1 = 0,5x10^{-5}m$ . El conteo de nódulos de grafito por unidad de volumen es obtenido a partir del conteo experimental de nódulos de grafito por unidad de superficie (ver tabla 7.1) utilizando la siguiente ecuación:

$$N_{set_i} = \frac{3}{4} \left( \frac{\pi N a_{set_i}^3}{f_{set_i}} \right)^{1/2} \quad (7.1)$$

donde  $Na_{set_i}$  es el conteo de nódulos de grafito por unidad de superficie de una familia  $i$  y  $f_{set_i}$  es la fracción volumétrica de nódulos de grafito de una familia  $i$  respecto del volumen total de nódulos de grafito.

Los parámetros del modelo de la transformación ausferrítica se obtienen mediante el ajuste de los resultados del modelo con los resultados experimentales, utilizando el método descrito en el Apéndice B. El número de combinación de ensayos utilizados para el ajuste es  $nens = 3$ , siendo estas configuraciones las  $NC2$ ,  $NC4T1$  y  $T3$ ; la elección se debe a que los materiales de estos ensayos tienen diferentes conteos de nódulos de grafito y son tratados a distintas temperaturas de austemperizado, permitiéndole al ajuste tener en cuenta la variación de dichas variables. En este caso, el número de resultados utilizados por cada combinación es  $nres = 12$ . La salida del modelo ( $r_m$ ) utilizada para realizar el ajuste es la variación normalizada de la longitud de la probeta ( $vd_m$ ), porque es la única información con la que se cuenta de los ensayos experimentales relacionada con la evolución de la transformación ausferrítica. La variación normalizada de la longitud se calcula de la siguiente manera:

$$vd_m = \frac{\Delta l}{\Delta l_{max}} \quad (7.2)$$

donde  $\Delta l$  es el desplazamiento del extremo de la probeta para un tiempo  $t$  y  $\Delta l_{max}$  es el máximo desplazamiento del extremo de la probeta.

Del análisis surge que los mejores valores para los parámetros que intervienen en la ecuación 5.74 son  $k_1 = 1,3257x10^{15}$  y  $k_2 = 4,72x10^3 J/mol$ . En la figura 7.2 se presenta

la variación normalizada de la longitud tanto computacional como experimental para las configuraciones de ensayos utilizadas en el proceso de ajuste, pudiéndose observar que los resultados obtenidos son buenos. A diferencia de los modelos existentes en la literatura, el modelo propuesto en esta tesis para la transformación ausferrítica, luego de un correcto ajuste de sus parámetros  $k_1$  y  $k_2$  para cada composición química, puede captar los efectos de los cambios de la temperatura de austemperizado y del conteo de nódulos de grafito sin tener que variar el valor de los parámetros.

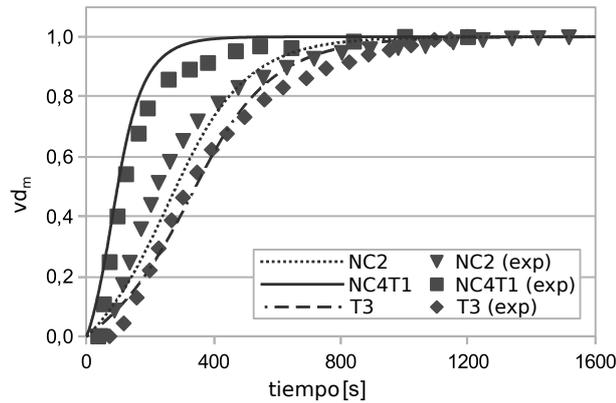


Figura 7.2: Variaciones normalizadas de la longitud de la probeta calculadas con el modelo y obtenidas experimentalmente.

## Resultados

En la figura 7.3 se presenta, para el tratamiento térmico correspondiente al ensayo NC3, la evolución de la temperatura en el punto 1 de la probeta; además se presenta la variación dimensional de la longitud de la probeta definida como  $vd = \Delta l/l_o$ , siendo  $l_o$  la longitud inicial de la probeta. Comparando los resultados obtenidos mediante el modelo con los obtenidos experimentalmente, se observa que la evolución de la temperatura está bien representada. En cuanto a la evolución de la variación dimensional de la longitud, durante el calentamiento y el enfriamiento (ambos sin cambio de fase), el modelo reproduce correctamente el comportamiento tanto cualitativamente (expansión durante el calentamiento y contracción durante el enfriamiento) como cuantitativamente; mientras que durante los cambios de fase se presentan algunas diferencias. La mayor discrepancia se produce durante el desarrollo de la transformación ausferrítica, obteniéndose una variación dimensional de la longitud simulada menor que la experimental, pero siendo una expansión en ambos casos. La causa de esta diferencia puede ser que la variación de la densidad de la austenita, producida sólo por su enriquecimiento en carbono (debido a que en esta etapa el proceso es isotérmico), no estaría suficientemente bien representada por la fórmula A.2 utilizada.

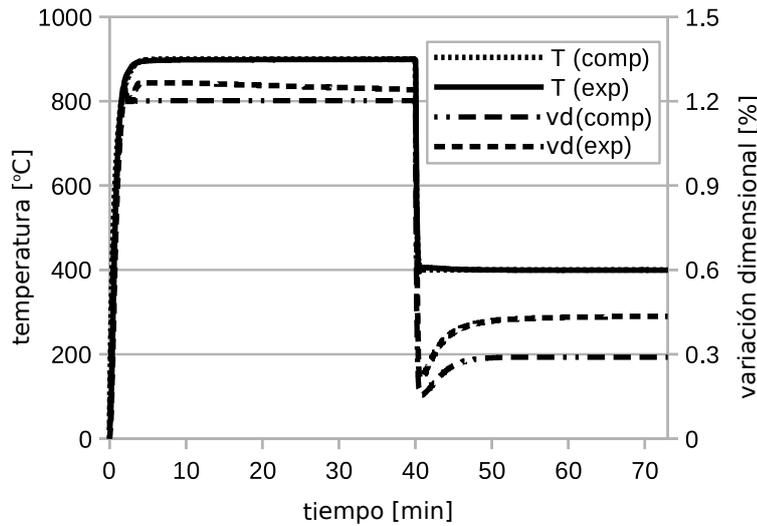


Figura 7.3: Evolución de la temperatura, en el punto 1 de la probeta, y de la variación longitudinal de la probeta respecto de su longitud inicial, durante todo el tratamiento térmico de austemperizado (ensayo NC3).

En la figura 7.4 se presenta la evolución de las fracciones volumétricas de grafito, de austenita, de subunidades de ferrita y de martensita computadas con el modelo, en el punto 1 de la probeta, durante todo el tratamiento térmico NC3. Se observa que la fracción de grafito varía durante el austenizado, manteniéndose constante en las restantes etapas del tratamiento térmico porque los modelos de cambio de fase para la transformación ausferrítica y martensítica no contemplan el intercambio de carbono entre los nódulos de grafito y la matriz. La fracción de austenita comienza a ser distinta de cero cuando comienza la transformación eutectoide inversa a la temperatura  $T_{EIMS}$ , llegando a su máximo valor durante el austenizado. La fracción de austenita disminuye como consecuencia de la transformación ausferrítica, en la cual parte de la austenita se transforma en subunidades de ferrita. La evolución de la fracción de subunidades de ferrita muestra un comportamiento sigmoideal tal como ha sido reportado en trabajos experimentales [Yescas, 2001, Fraś et al., 2012].

Predecir el tiempo requerido para que una pieza tenga una matriz completamente austenítica con una concentración de carbono homogénea a la temperatura de austenizado elegida es muy importante en el diseño del tratamiento térmico. En la figura 7.5 se presenta el tiempo mínimo requerido para que las probetas alcancen la mencionada condición a la temperatura de austenizado. En dicha figura en el eje de las abscisas se encuentran los tiempos obtenidos por medio de los ensayos experimentales y en el eje de las ordenadas los tiempos obtenidos por medio de la simulación. Si los tiempos obtenidos de ambas maneras son iguales, los puntos se ubicarían sobre la recta cuya pendiente vale uno. Comparando los resultados numéricos y experimentales se observa que, salvo para el ensayo *NC3*, el tiempo calculado con el modelo es menor que el de los ensayos, ocurriendo las mayores diferencias (próximas a 45 %) para

## 7.2. Simulación de ensayos experimentales

conteos de nódulos de grafito bajos. Cuando el conteo de nódulos es bajo, el proceso de homogeneización del carbono en la austenita es más prolongado, teniendo mayor influencia en el mencionado tiempo mínimo requerido. El proceso de homogeneización del carbono está gobernado por la difusión de carbono en la austenita, pudiendo deberse la diferencia encontrada a que la ecuación A.18, utilizada para calcular el coeficiente de difusión de carbono en la austenita, no contempla la influencia de los elementos de aleación de la austenita.

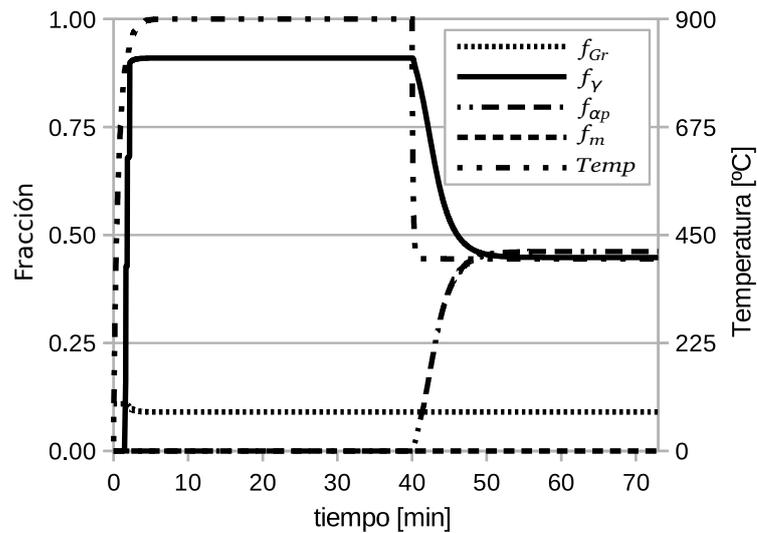


Figura 7.4: Evolución de las fracciones volumétricas de fase y de la temperatura, en el punto 1 de la probeta, durante todo el tratamiento térmico de austemperizado (ensayo NC3).

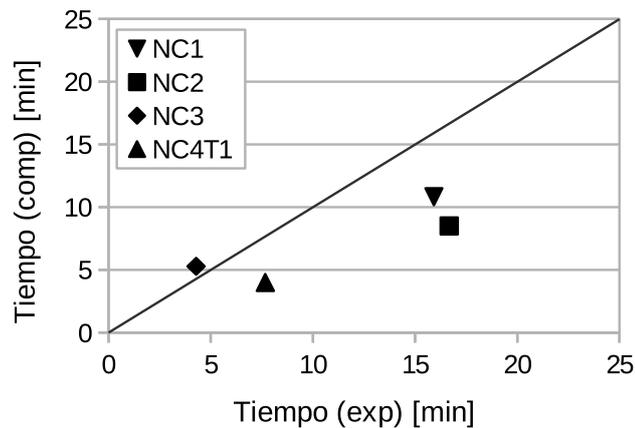


Figura 7.5: Tiempo mínimo requerido para que las probetas se austenicen por completo.

## Capítulo 7. Aplicación del modelo TMM

Como se comentó en el Capítulo 2, la temperatura de austemperizado y el conteo de nódulos de grafito tienen una gran influencia en el desarrollo de la transformación ausferrítica. Predecir el tiempo de austemperizado para obtener una matriz completamente ausferrítica, al final del tratamiento térmico, es de gran importancia para lograr las propiedades mecánicas buscadas. Como se observó en el Capítulo 6, el modelo propuesto es sensible a la temperatura de austemperizado y al conteo de nódulos de grafito. En este Capítulo se valida dicho comportamiento utilizando resultados de los ensayos experimentales.

En la figura 7.6a se presenta el tiempo de austemperizado requerido para que la transformación ausferrítica finalice, cuando se varía el conteo de nódulos de grafito y se mantiene constante la temperatura de austemperizado. Si bien la temperatura de austemperizado no es la misma para todas las probetas, esta diferencia no es tenida en cuenta ya que es igual a  $20^{\circ}\text{C}$  y, como se vio en el Capítulo 6, este parámetro no afecta significativamente la cinética de la transformación ausferrítica. En la figura es posible observar que, al igual que en el análisis de sensibilidad, a medida que aumenta el conteo de nódulos de grafito disminuye el tiempo de austemperizado. Comparando los resultados numéricos con los experimentales, se concluye que el modelo representa correctamente el efecto de la variación del tamaño de los nódulos de grafito sobre el tiempo de austemperizado.

En la figura 7.6b se presenta el tiempo de austemperizado requerido para que la transformación ausferrítica finalice, cuando se varía la temperatura de austemperizado y se mantienen constantes el conteo de los nódulos de grafito y la temperatura de austemperizado. Puede verse que, al igual que en el análisis de sensibilidad, a medida que aumenta la temperatura de austemperizado disminuye el tiempo requerido para que la transformación ausferrítica finalice. Comparando los resultados numéricos con los experimentales se concluye que el modelo representa correctamente el efecto de la variación de la temperatura de austemperizado.

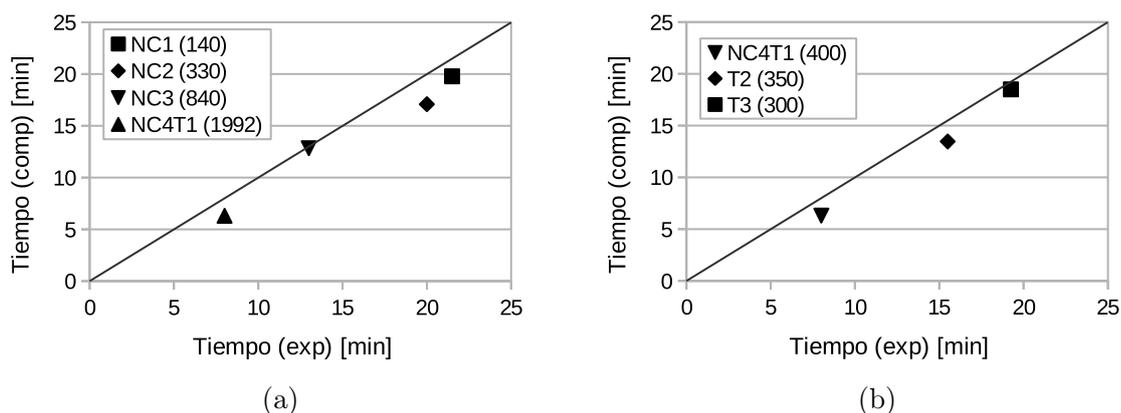


Figura 7.6: Tiempo de austemperizado requerido para que la transformación ausferrítica finalice. Influencia de (a) el conteo de nódulos de grafito y (b) la temperatura de austemperizado.

### 7.2.2. Ensayos con distintos tiempos de austemperizado

Los ensayos experimentales a simular son los presentados por Batra *et al.* [Batra et al., 2007] y que fueron realizados variando el tiempo de austemperizado de manera de obtener distintos tipos de matrices finales, las cuales van desde martensíticas hasta ausferríticas.

Las probetas ensayadas están hechas con fundiciones de hierro nodular de distintas composiciones químicas, como se observa en la tabla 7.3. Para cada una de las composiciones químicas, la microestructura inicial es distinta tal como puede verse en la tabla 7.4. Las probetas son pequeñas y con una geometría prismática recta de sección cuadrada ( $55\text{mm} \times 10\text{mm} \times 10\text{mm}$ ).

Se realizaron tres ensayos variando el tipo de fundición nodular y los parámetros del tratamiento térmico (ver la tabla 7.5).

Material	<i>C</i>	<i>Si</i>	<i>Mn</i>	<i>Cr</i>	<i>Ni</i>	<i>Cu</i>	<i>Ti</i>	<i>Mo</i>	<i>Sn</i>	<i>V</i>	<i>Al</i>
M1	3.48	2.028	0.22	0.05	0.016	0.6	0.04	0.03	0.0079	0.012	0.02
M2	3.48	1.83	0.23	0.01	1.05	0.6	0.04	0.015	0.0046	0.002	0.02

Tabla 7.3: Composición química de la fundición de hierro nodular, en %*peso*, de los ensayos con distintos tiempos de austemperizado.

Material	Conteo de nódulos de grafito [ <i>nod/mm</i> <sup>2</sup> ]	Fracción de grafito [ <i>vol</i> ]	Fracción de ferrita [ <i>vol</i> ]	Fracción de perlita [ <i>vol</i> ]
M1	250	0.09	0.045	0.865
M2	198	0.09	0.035	0.875

Tabla 7.4: Microestructuras iniciales de las probetas utilizadas en los ensayos con distintos tiempos de austemperizado.

Ensayo	Material	$T_\gamma$ [ $^{\circ}\text{C}$ ]	$T_A$ [ $^{\circ}\text{C}$ ]	$t_\gamma$ [ <i>min</i> ]	$t_A$ [ <i>min</i> ]
E1	M1	900	330	60	5-150
E2	M1	850	330	120	5-150
E3	M2	850	330	120	5-150

Tabla 7.5: Configuraciones de los ensayos con distintos tiempos de austemperizado.

### Modelado

Para simular el tratamiento térmico de austemperizado se modela una geometría correspondiente a 1/8 de la probeta, porque existen tres planos de simetría. Tal como puede verse en la figura 7.7, se restringen adecuadamente los desplazamientos normales a las caras 1, 2 y 3 para aplicar las condiciones de simetría en el problema mecánico, mientras que para aplicar las condiciones de simetría en el problema térmico se hace cero el flujo de calor normal a dichas caras. Para modelar el intercambio de calor entre la probeta y el medio ambiente por convección-radiación se aplican las condiciones de

## Capítulo 7. Aplicación del modelo TMM

borde en las caras 4, 5 y 6. Las mallas de elementos finitos para los problemas térmico y mecánico se realizaron con 540 elementos hexaédricos de 8 nodos. El número de elementos se determinó realizando un estudio de la convergencia de los resultados para ambos problemas. La temperatura y el desplazamiento longitudinal son medidos en el punto 1 (ver figura 7.7).

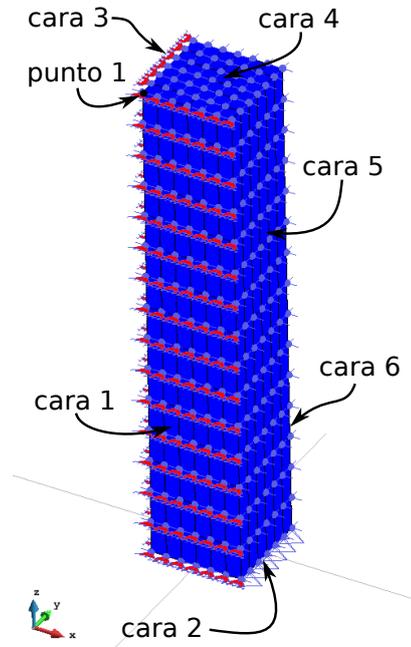


Figura 7.7: Discretización de la geometría modelada para simular los ensayos con distintos tiempos de austemperizado.

Las propiedades térmicas y mecánicas de la fundición de hierro nodular se encuentran en las tablas A.1 y A.2 del Apéndice A. El coeficiente de transferencia de calor es  $h = 70 J/(sm^2 \text{ } ^\circ C)$  durante todo el calentamiento y durante el enfriamiento desde la temperatura de austemperizado hasta la ambiente; mientras que es igual a  $h = 400 J/(sm^2 \text{ } ^\circ C)$  durante el enfriamiento desde la temperatura de austenizado hasta la de austemperizado.

Respecto al modelo metalúrgico, para ambos materiales los nódulos de grafito y las colonias de perlita son agrupadas en una única familia ( $nfamg = 1$  y  $nfamc = 1$ ). El espaciado interlaminar de la perlita no fue medido experimentalmente; tal como se observó en el Capítulo 6, esta variable no influye sustancialmente en el proceso de austenizado. En esta simulación se optó por una perlita gruesa de  $ips_1 = 0,5 \times 10^{-5} m$ . El conteo de nódulos de grafito por unidad de volumen es obtenido a partir del conteo experimental de nódulos de grafito por unidad de superficie (ver tabla 7.4) utilizando la ecuación 7.1.

Los parámetros de los modelos de las transformaciones ausferrítica y martensítica se obtienen ajustando el modelo con los resultados experimentales. La salida del

## 7.2. Simulación de ensayos experimentales

modelo utilizada para realizar dicho ajuste es la fracción de austenita al final del tratamiento térmico, porque es la única información con la que se cuenta de los ensayos experimentales relacionada con la evolución de estas transformaciones. Los valores de los parámetros para la transformación ausferrítica son  $k_1 = 8 \times 10^{15}$  y  $k_2 = 4,7 \times 10^3 \text{ J/mol}$ , mientras que para la transformación martensítica es  $c_2 = 0,006$ .

### Resultados

En la figura 7.8 se presentan las evoluciones de la temperatura y del desplazamiento longitudinal en el punto 1 de la probeta, computadas con el modelo para el ensayo E1. En la curva de evolución de la temperatura se observa el ciclo térmico al que fue sometida la probeta. En la curva de evolución del desplazamiento se identifican las regiones A, B y C, en las que se observa el efecto de las transformaciones eutectoide inversa, ausferrítica y martensítica, respectivamente.

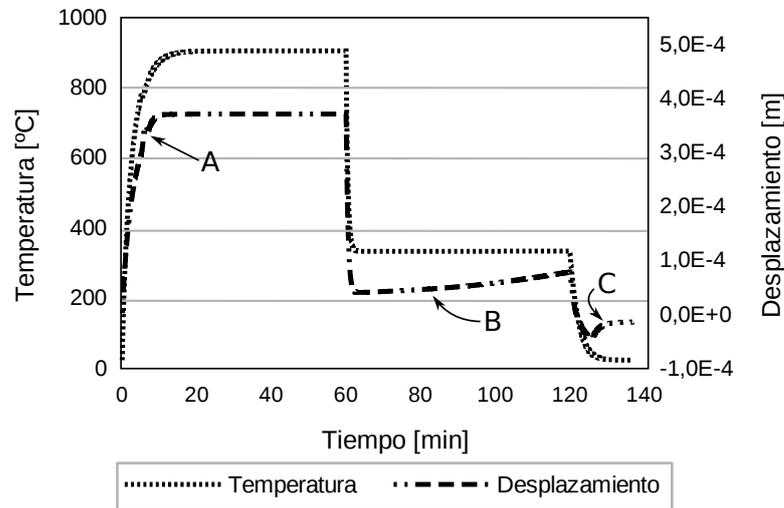


Figura 7.8: Evolución de la temperatura y del desplazamiento longitudinal, en el punto 1 de la probeta, correspondiente al ensayo E1 (tiempo de austemperizado 60min).

En la figura 7.9 se presentan las fracciones de fase al final del tratamiento térmico en función del tiempo de austemperizado. En dicha figura pueden verse tanto las fracciones volumétricas de nódulos de grafito, de subunidades de ferrita, de martensita y de austenita calculadas con el modelo, como así también la fracción de austenita ( $f_{\gamma_{exp}}$ ) obtenida por Batra *et al.* [Batra et al., 2007] a partir de los ensayos experimentales. Las fracciones calculadas con el modelo son representadas mediante líneas suavizadas para facilitar la observación de las mismas.

En todos los ensayos simulados se encontró que la fracción volumétrica final de nódulos de grafito se mantiene constante, independientemente del tiempo de austemperizado considerado. Este comportamiento se debe a que el modelo no considera el intercambio de carbono entre los nódulos de grafito y la matriz metálica durante las

Capítulo 7. Aplicación del modelo TMM

transformaciones ausferrítica y martensítica. Por otro lado, la fracción volumétrica de subunidades de ferrita aumenta a medida que lo hace el tiempo de austemperizado. Un comportamiento opuesto se observa en la evolución de la fracción de martensita. La evolución de la austenita presenta un máximo para un tiempo de austemperizado próximo a los 80min.

Comparando la fracción de austenita obtenida en la simulación con la medida en los ensayos experimentales, se observa que el modelo representa correctamente la evolución de dicha fase. Para tiempos muy cortos de austemperizado, cuando la fracción de subunidades de ferrita es prácticamente nula, la fracción de austenita computada es más elevada que la experimental. Para tiempos de austemperizado mayores, cuando sólo se desarrolla la transformación ausferrítica durante el enfriamiento de la probeta (no se forma martensita), el modelo predice mejor el valor de dicha fracción. El comportamiento de la evolución de la fracción volumétrica de austenita en función del tiempo de austemperizado, observada tanto en las simulaciones como en los ensayos experimentales, es similar a la observada en el análisis de sensibilidad 2 del Capítulo 6.

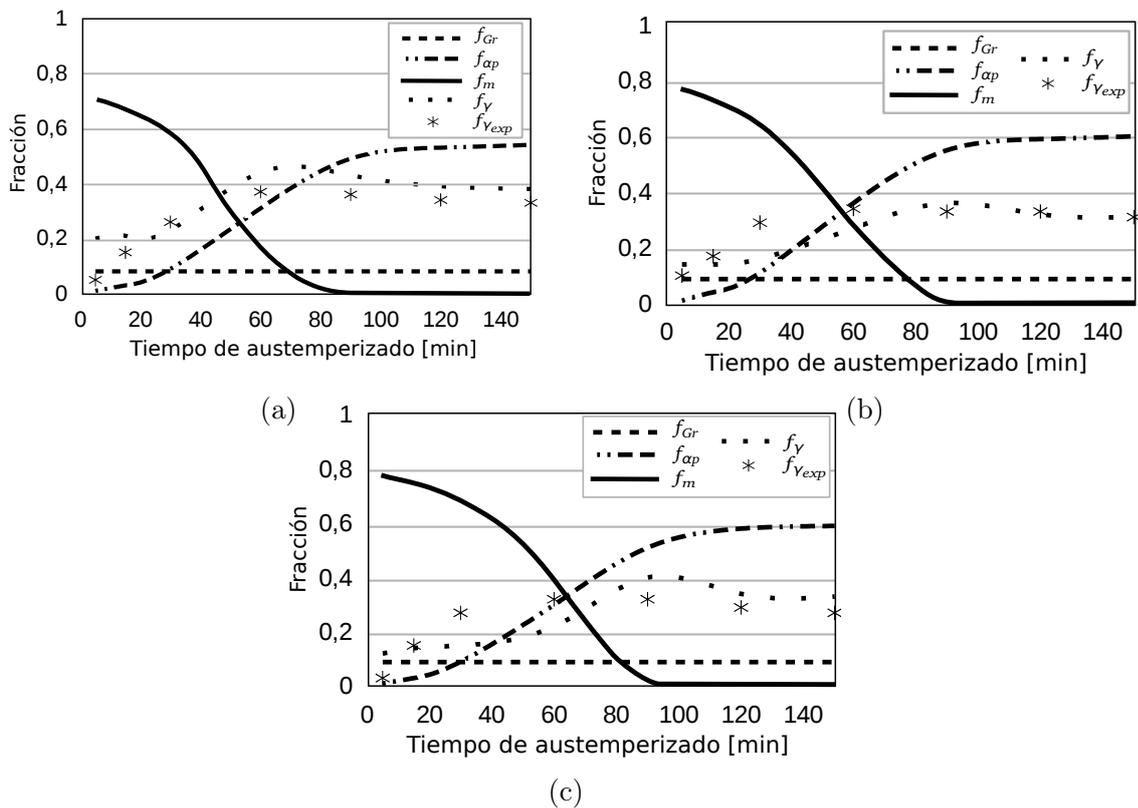


Figura 7.9: Fracciones volumétricas de fase al final del tratamiento de austemperizado, en función del tiempo de austemperizado, para los ensayos: (a) E1, (b) E2 y (c) E3.

## 7.3. Caso de estudio

Con la finalidad de mostrar la potencialidad de la herramienta computacional presentada, se estudia numéricamente el tratamiento térmico de austemperizado *de tres pasos* de una pieza de aplicación automotriz denominada muñón de dirección. Esta pieza es un elemento de seguridad, ya que forma parte de los sistemas de suspensión y de transmisión de los vehículos livianos de tracción delantera. Una pieza similar pero sometida a un tratamiento de austemperizado *in situ* fue analizada mediante ensayos experimentales por Mendez *et al.* [Mendez et al., 2015].

Se considera que el muñón de dirección está fabricado con la fundición de hierro nodular presentada en la referencia [Batra et al., 2007] y aquí denominada M1 (ver tablas 7.3 y 7.4). De esta forma los parámetros de los modelos de las transformaciones ausferrítica y martensítica son conocidos.

Se considera que la microestructura inicial es la misma en todo el volumen de la pieza. El austenizado se realiza a  $900^{\circ}\text{C}$  durante  $60\text{min}$  y el austemperizado se realiza a  $350^{\circ}\text{C}$ . Se analizan tres casos que difieren en el tiempo de austemperizado. Los tiempos considerados son  $8\text{min}$ ,  $60\text{min}$  y  $120\text{min}$ , resultando una composición de la microestructura diferente para cada uno de ellos.

### Modelado

Para este estudio se utiliza el programa de elementos finitos Abaqus, al cual se le incorporó el modelo metalúrgico mediante subrutinas de usuario (ver Apéndice C). La pieza se modela utilizando una geometría tridimensional, que es mallada con 263.243 tetraedros lineales del tipo C3D4T (nomenclatura de Abaqus), ver figura 7.10. El número de elementos se determinó realizando un análisis de convergencia de los resultados para los problemas térmico y mecánico.

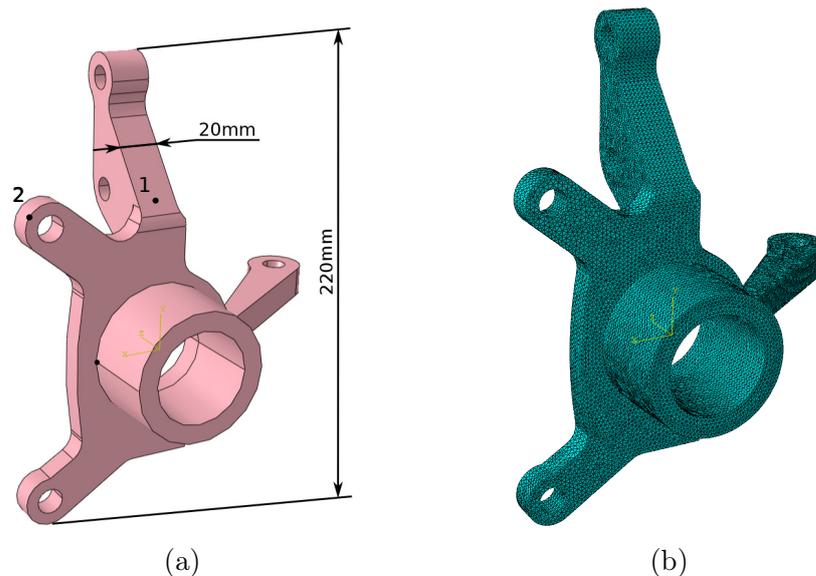


Figura 7.10: Muñón de dirección: (a) geometría modelada y (b) malla de elementos finitos.

## Capítulo 7. Aplicación del modelo TMM

En el problema mecánico se restringieron seis grados de libertad para evitar el movimiento de cuerpo rígido de la pieza. En el problema térmico se aplicaron en las superficies externas de las piezas las condiciones de borde para modelar el intercambio de calor por convección-radiación. El coeficiente de transferencia de calor es  $h = 70J/(sm^2 \text{ } ^\circ C)$  durante todo el calentamiento y durante el enfriamiento desde la temperatura de austemperizado hasta la ambiente; mientras que es igual a  $h = 400J/(sm^2 \text{ } ^\circ C)$  durante el enfriamiento desde la temperatura de austenizado hasta la de austemperizado.

Las propiedades térmicas y mecánicas de la fundición de hierro nodular se muestran en las tablas A.1 y A.2 del Apéndice A. En el modelo metalúrgico, tanto los nódulos de grafito como las colonias de perlita son agrupados en una única familia ( $nfamg = 1$  y  $nfamc = 1$ ). El conteo de nódulos de grafito por unidad de volumen, el espaciado interlaminar de la perlita y los parámetros de los modelos de las transformaciones ausferrítica y martensítica son los determinados anteriormente para el material M1 ( $N_{set_1} = 5,2 \times 10^{12} \text{ nod}/m^3$ ,  $ips_1 = 0,5 \times 10^{-5} m$ ,  $k_1 = 8 \times 10^{15}$ ,  $k_2 = 4,7 \times 10^3 J/mol$  y  $c_2 = 0,006$ ).

### Resultados

Debido a la geometría de la pieza, no existe una gran diferencia en la evolución de la temperatura en sus distintos puntos. En la figura 7.11 se presenta la evolución de la temperatura de los puntos 1 y 2 (ver figura 7.10) durante todo el tratamiento térmico; siendo estos puntos los que presentan la mayor diferencia de temperatura entre sí. Comparando la evolución de la temperatura en esta pieza con la de la probeta del ensayo con distintos tiempos de austemperizado (ver figura 7.8), se observa que el tiempo requerido para alcanzar la temperatura de austenizado en toda la pieza es  $25min$  mayor en el muñón de dirección que en la probeta; debiéndose esta diferencia a las características geométricas de muñón.

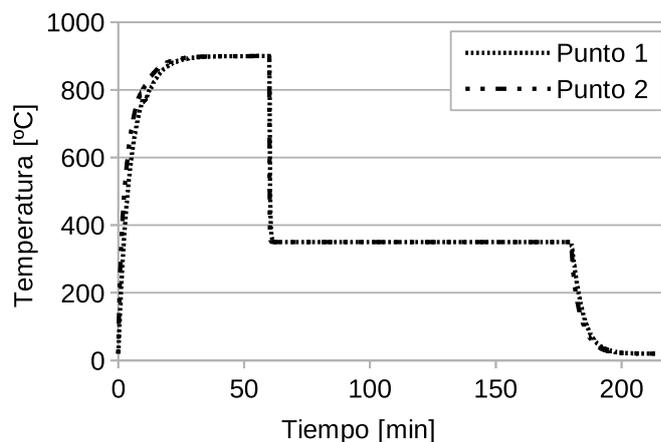


Figura 7.11: Evolución de la temperatura en los puntos 1 y 2 del muñón de dirección.

### 7.3. Caso de estudio

Como consecuencia de la mencionada similitud de la evolución de la temperatura en los distintos puntos, no se presenta una gran diferencia en la evolución de las fases entre las distintas regiones de la pieza. En la figura 7.12 se muestra la fracción volumétrica de subunidades de ferrita al final del tratamiento térmico para un tiempo de austemperizado de  $60min$ , observándose que dicha fracción es prácticamente la misma en toda la pieza.

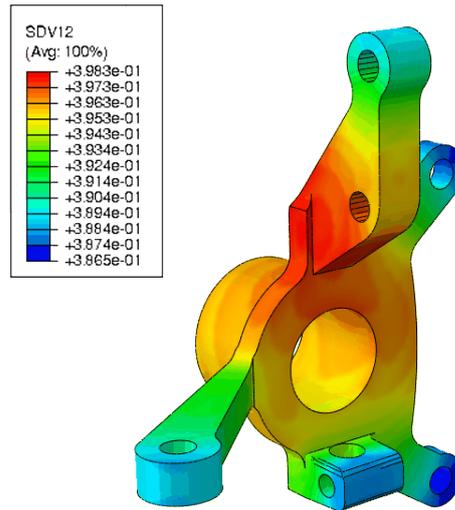


Figura 7.12: Fracción volumétrica de subunidades de ferrita, al final del tratamiento térmico, para un tiempo de austemperizado de  $60min$ .

En la figura 7.13 se presentan las fracciones volumétricas de fase al final del tratamiento térmico en función del tiempo de austemperizado, en el punto 1 de la pieza. Se observa que a medida que el tiempo de austemperizado aumenta, disminuye la fracción de martensita y aumenta la fracción de subunidades de ferrita; mientras que la evolución de la fracción de austenita presenta un máximo para  $T_A = 60min$ .

Por último, las deformaciones y tensiones residuales de la pieza al final del tratamiento térmico, para los tres tiempos de austemperizado considerados, se presentan en las figuras 7.14 y 7.15. Se observa que las deformaciones varían con el tiempo de austemperizado, porque la densidad final de la pieza varía con las fracciones finales de fase. Cuando la matriz tiene una gran cantidad de martensita, lo que ocurre para un tiempo de austemperizado de  $8min$ , la pieza se expande; mientras que para los otros tiempos analizados, la matriz de la pieza está formada principalmente por subunidades de ferrita y austenita y, por lo tanto, se contrae; produciéndose la mayor contracción para un tiempo de austemperizado de  $60min$ . En cuanto a las tensiones residuales, se observa que éstas no presentan grandes variaciones con el tiempo de austemperizado. Esto se debe a que las tensiones son ocasionadas por las deformaciones generadas durante el rápido enfriamiento desde la temperatura de austenizado hasta la de austemperizado.

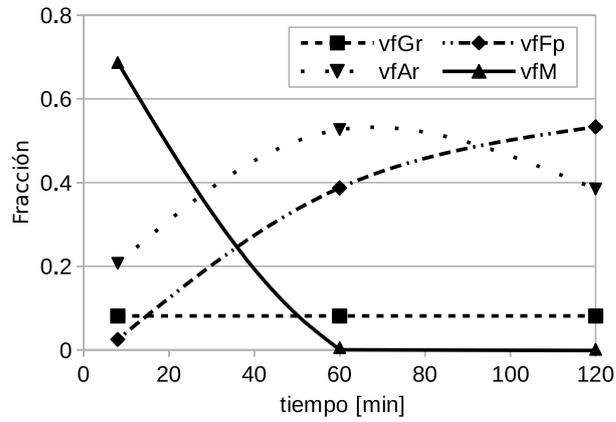


Figura 7.13: Fracciones volumétricas de fase en el punto 1 del muñón de dirección, al final del tratamiento térmico, en función del tiempo de austemperizado.

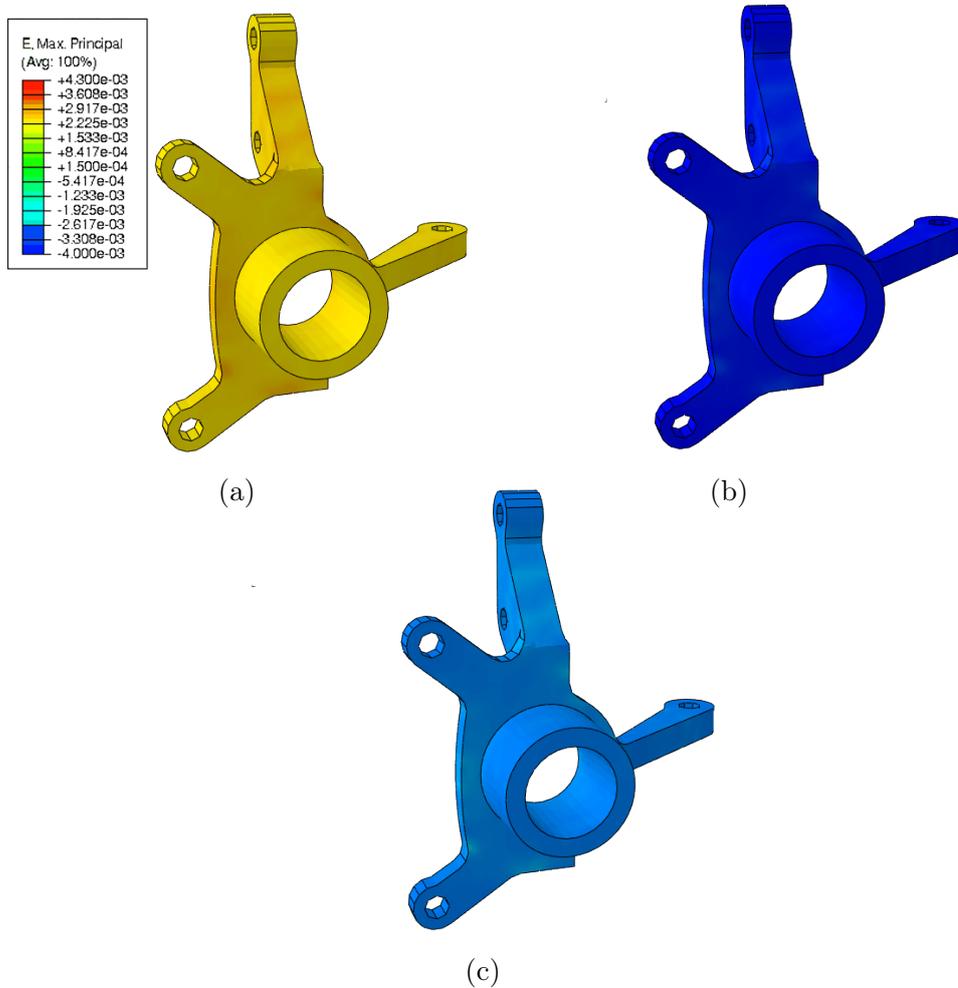


Figura 7.14: Distribución de las deformaciones al final del tratamiento térmico para un tiempo de austemperizado de: (a) 8min, (b) 60min y (c) 120min.

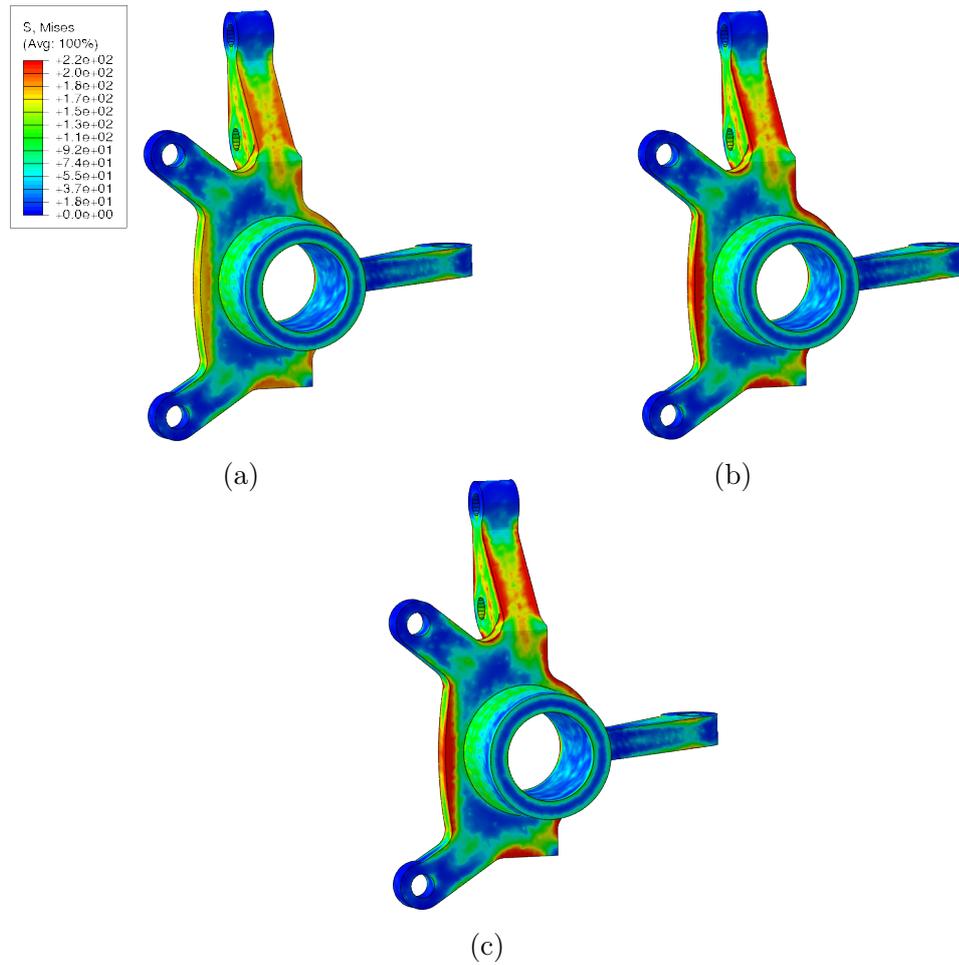


Figura 7.15: Distribución de las tensiones residuales, en  $MPa$ , al final del tratamiento térmico para un tiempo de austemperizado de: (a)  $8min$ , (b)  $60min$  y (c)  $120min$ .



# Capítulo 8

## Conclusiones y líneas futuras de trabajo

### 8.1. Principales desarrollos presentados en esta tesis

En la presente tesis se propuso un nuevo modelo computacional para la simulación del tratamiento térmico de austemperizado *de tres pasos* de una fundición de hierro nodular. El modelo plantea la resolución acoplada de los problemas térmico, mecánico y metalúrgico. Los problemas térmico y mecánico se resuelven en la escala macroscópica cuyas ecuaciones de gobierno son resueltas mediante las técnicas de elementos finitos y de diferencias finitas. El problema metalúrgico se resuelve en la escala microscópica y la microestructura es representada a través de elementos de volumen representativo.

Las principales características del nuevo modelo son:

- El tratamiento térmico de austemperizado se modela teniendo en cuenta los siguientes aspectos: (a) composición química y microestructura inicial de la fundición de hierro nodular, (b) tiempos y temperaturas del tratamiento térmico y (c) tamaño y geometría de la pieza.
- El modelo metalúrgico contempla la evolución de la microestructura, a lo largo de todo el tratamiento térmico, mediante el empleo de modelos de cambios de fase para las transformaciones eutectoide inversa, ausferrítica y martensítica.

*Modelo de la transformación eutectoide inversa:*

- Microestructura inicial compuesta por nódulos de grafito, que pueden ser de distintos tamaños, y una matriz metálica que puede ser ferrítica, perlítica o ferrítica-perlítica (con distintas fracciones de ferrita y perlita).

## Capítulo 8. Conclusiones y líneas futuras de trabajo

- La austenita formada a partir de la ferrita y de los nódulos de grafito nuclea instantáneamente en forma de halo en la superficie de los nódulos de grafito. El crecimiento está gobernado por la difusión de carbono.
- La austenita formada a partir de la perlita nuclea instantáneamente en forma de lámina en la intercara ferrita-cementita. El crecimiento está gobernado por la difusión de carbono.

### *Modelo de la transformación ausferrítica:*

- Microestructura inicial compuesta por nódulos de grafito, que pueden ser de distintos tamaños, y una matriz completamente austenítica.
- La formación de las subunidades de ferrita se modela como un proceso de nucleación continua y de crecimiento displacivo.
- Las regiones en las cuales las subunidades se forman son: (a) la superficie de los nódulos de grafito y (b) las puntas de las subunidades de ferrita existentes.
- La ley de nucleación tiene dos parámetros que deben ser ajustados con datos experimentales.
- Se contempla la evolución de las fracciones y de las concentraciones de carbono de distintas regiones de austenita.

### *Modelo de la transformación martensítica:*

- La formación de martensita tiene en cuenta las diferentes concentraciones de carbono de las distintas regiones de austenita.
- El modelo tiene en cuenta la característica adifusional de la formación de martensita. También tiene en cuenta que la fracción de martensita depende de la temperatura del material y no del tiempo.
- La ley de la evolución de la fracción de martensita, respecto de la temperatura, tiene un parámetro que debe ser ajustado con datos experimentales.

## 8.2. Conclusiones

En esta tesis se ha modelado el tratamiento de austemperizado *de tres pasos* de la fundición de hierro nodular y se ha logrado predecir la evolución de la microestructura del material y de las tensiones y deformaciones de la pieza mediante la simulación, en forma continua, de la totalidad del proceso; cumpliéndose así el objetivo general planteado.

Se alcanzaron también los objetivos específicos propuestos. Con respecto a los mismos y en correspondencia con cada uno de ellos se concluye lo siguiente:

1. Se modelaron los cambios de fase que ocurren durante el tratamiento de austemperizado; la representación de cada uno se hizo de manera tal de posibilitar

la relación entre ellos y la simulación continua del proceso. Las conclusiones más importantes son las que se presentan a continuación.

- Las transformaciones eutectoide inversa estable y metaestable tienen distintas velocidades, siendo la transformación eutectoide inversa metaestable la de mayor velocidad. Considerando el desarrollo de ambas por separado es posible captar el efecto que tienen los distintos tipos de matrices iniciales en el desarrollo de la etapa de austenizado.
  - Debido a la naturaleza de la transformación ausferrítica (mecanismo de crecimiento displacivo) la nucleación de las subunidades de ferrita tiene un rol muy importante en el desarrollo de dicha transformación, porque el tiempo de incubación de las subunidades es mucho mayor que el tiempo de crecimiento. La ley de nucleación utilizada en el modelo propuesto tiene en cuenta la nucleación de subunidades en la superficie de los nódulos de grafito y en las puntas de las subunidades existentes, lo que permite tener en cuenta: a) el efecto del tamaño de los nódulos de grafito y b) el efecto de la nucleación autocatalítica.
  - El desarrollo de la transformación martensítica depende principalmente de la concentración de los elementos de aleación de la austenita. La homogeneización de la concentración de carbono en la austenita, que ocurre a la temperatura de austenizado, y la transformación ausferrítica modifican la concentración y la distribución del carbono en la austenita.
2. El modelo del austemperizado *de tres pasos* desarrollado fue implementado en un programa de elementos finitos académico y tiene en cuenta los problemas térmico, mecánico y metalúrgico involucrados en el tratamiento. Las interacciones consideradas entre los tres problemas tienen un rol muy importante en la modelización porque permiten considerar los principales aspectos del tratamiento térmico de austemperizado, tales como: el inicio de las transformaciones de fase a las temperaturas correspondientes, la variación de la evolución de la temperatura ocasionada por el calor latente de los cambios de fase y las variaciones de las dimensiones de la pieza producidas por los cambios de temperatura y de fase.
  3. Con respecto al objetivo de validar el modelo utilizando resultados experimentales, se concluye que la evolución de la temperatura es bien representada, al igual que la variación dimensional de la pieza. Luego de un correcto ajuste de los parámetros del modelo metalúrgico, los tiempos de austenizado y austemperizado son correctamente predichos, pudiéndose captar adecuadamente el efecto del conteo de nódulos de grafito y de la temperatura de austemperizado sobre la cinética de la transformación ausferrítica, indicando que la ley propuesta para la nucleación representa correctamente la nucleación de las subunidades en la superficie de los nódulos de grafito y en las puntas de las subunidades. Cuando la transformación ausferrítica no se desarrolla por

completo, el modelo puede predecir correctamente las fracciones de las distintas fases al final de tratamiento de austemperizado (subunidades de ferrita, austenita y martensita).

4. Se realizó un estudio de sensibilidad para evaluar el funcionamiento del modelo y comprender el efecto de cada variable de entrada; del mismo se extraen las conclusiones que a continuación se detallan.
  - Los tiempos del tratamiento térmico dependen de varios factores entre los cuales se encuentran la geometría y el tamaño de la pieza. A medida que la pieza es de mayor tamaño, aumenta el tiempo mínimo requerido para el austenizado. Para una misma geometría y un mismo tamaño de la pieza, el tiempo mínimo requerido de austenizado disminuye al incrementar tanto el conteo de nódulos de grafito como la temperatura de austenizado; mientras que el tiempo mínimo requerido para que la transformación ausferrítica finalice disminuye al incrementar tanto el conteo de nódulos de grafito como la temperatura de austemperizado.
  - Cuando la transformación ausferrítica se desarrolla por completo, la fracción en volumen de subunidades de ferrita disminuye al incrementar las temperaturas de austenizado y austemperizado, mientras que la fracción de austenita se comporta de manera opuesta. Bajo esta condición de tiempo de austemperizado no se desarrolla la transformación martensítica. Cuando el tiempo de austemperizado no es el suficiente como para que la transformación ausferrítica se complete, se desarrolla la transformación martensítica. Mientras menor es el tiempo de austemperizado, mayor es la fracción volumétrica de martensita y menores son las fracciones volumétricas de subunidades de ferrita y de austenita.
  - La variación de las dimensiones de la pieza al final del tratamiento térmico depende principalmente del tipo de fases que componen a las matrices inicial y final, tal como se observa en las simulaciones realizadas en este trabajo para los distintos tamaños y geometrías de probetas. A medida que aumenta la fracción inicial de perlita, aumentan las dimensiones finales de la pieza; un efecto similar ocurre a medida que aumenta la fracción de martensita.
5. En relación al objetivo de implementar el modelo metalúrgico en el programa de elementos finitos comercial Abaqus, se concluye que su implementación a través de subrutinas de usuario pudo ser realizada sin mayor dificultad. Con este programa se simuló el tratamiento térmico de una pieza de geometría compleja para distintos tiempos de austemperizado. En dicha simulación el comportamiento de las fracciones volumétricas de subunidades de ausferrita, austenita y martensita se correspondió con las observaciones experimentales [Yescas, 2001, Batra et al., 2004, Batra et al., 2007, Fraś et al., 2012].

### 8.3. Contribuciones originales

El trabajo aquí presentado extiende el estado del arte actual referido a la simulación del tratamiento térmico de austemperizado de una fundición de hierro nodular. Las principales contribuciones originales de esta tesis son:

- Se ha simulado de manera continua el tratamiento térmico de austemperizado *de tres pasos* de una fundición de hierro nodular con un modelo acoplado termomecánico-metalúrgico.
- Se han desarrollado ecuaciones para acoplar el modelo metalúrgico con la formulación termomecánica.
- Se ha modelado el cambio de fase para la transformación eutectoide inversa teniendo en cuenta: (a) la cantidad total y la distribución de tamaño de los nódulos de grafito y (b) una matriz inicial del tipo ferrítica, ferrítica-perlítica o perlítica.
- Se ha modelado el cambio de fase para la transformación ausferrítica teniendo en cuenta: (a) la cantidad total y la distribución de tamaño de los nódulos de grafito, (b) evolución de las fracciones de ausferrita y de subunidades de ferrita, (c) nucleación de las subunidades de ferrita en la superficie de los nódulos de grafito y en las puntas de las subunidades existentes y (d) distintas regiones en la austenita que tienen distintas concentraciones de carbono. A diferencia de los modelos encontrados en la bibliografía, este sólo tiene dos parámetros a ser ajustados.
- Se ha modelado de cambio de fase para la transformación martensítica que tiene en cuenta la microestructura resultante de la transformación ausferrítica.

### 8.4. Líneas futuras de trabajo

En los modelos propuestos se han aplicado distintas hipótesis simplificativas, cuya eliminación requiere de nuevas investigaciones al respecto. Los aspectos más relevantes son:

- Los modelos de cambios de fase propuestos no tienen en cuenta las microsegregaciones dentro de los elementos de volumen representativo, es decir, que la concentración de los elementos de aleación fue asumida homogénea en la matriz metálica. Si bien esta simplificación ha sido empleada en numerosos modelos de cambios de fase desarrollados para la fundición de hierro nodular, experimentalmente se ha observado la influencia de las microsegregaciones tanto en la determinación de los sitios de nucleación, como en la cinética de las transformaciones de fases.

## Capítulo 8. Conclusiones y líneas futuras de trabajo

- El modelo de cambio de fase de la transformación ausferrítica requiere información de las dimensiones de las subunidades de ferrita. Como esa información no se encontró en la literatura se utilizó la disponible para aceros bainíticos. Se considera importante actualizar el modelo a medida que se lleven a cabo nuevas investigaciones sobre la caracterización de dichas subunidades.
- El modelo utilizado para calcular las deformaciones por cambios de temperatura y de fase tiene en cuenta características microestructurales como las fracciones de fase y sus densidades, pero no considera la interacción mecánica entre fases. La utilización de modelos más sofisticados permitiría tener en cuenta fenómenos como el despegue entre el nódulo de grafito y la matriz metálica.
- El modelo mecánico considera que las propiedades constitutivas de las fundición de hierro nodular son independientes del tipo de microestructura. Se ha reportado experimentalmente que el tipo de matriz metálica influye en el módulo de elasticidad y en la tensión de fluencia del material, hecho que cambiaría la respuesta mecánica del material sobre todo cuando se produzcan tensiones próximas a la tensión de fluencia.

Por otro lado, durante el desarrollo de esta tesis han surgido nuevas ideas que extenderían el uso del modelo propuesto, las cuales se presentan a continuación:

- Durante el enfriamiento desde la temperatura de austenizado hasta la de austemperizado no se ha considerado el desarrollo de la transformación eutectoide. En los ensayos experimentales utilizados para la validación no se produjo dicha transformación porque se superó la velocidad crítica de enfriamiento. En piezas de mayor tamaño, como las que comúnmente se utilizan en la industria automotriz, no siempre es posible superar dicha velocidad en todos los puntos de la pieza. Con el fin de mejorar el carácter predictivo del modelo en tales casos, se propone implementar un modelo de cambio de fase para la transformación eutectoide.
- Experimentalmente se está desarrollando un tratamiento termomecánico de austemperizado, en el cual mediante una gran deformación de la fundición nodular a elevada temperatura, se logra una microestructura más refinada. El modelo metalúrgico propuesto requeriría de nuevos modelos de cambios de fase porque el acoplamiento entre los modelos metalúrgico-mecánico, en tales casos, es bidireccional.

# Bibliografía

- [Achary and Venugopalan, 2000] Achary, J. and Venugopalan, D. (2000). Microstructural development and austempering kinetics of ductile iron during thermomechanical processing. *Metallurgical and Materials Transactions A*, 31A:2575–2585.
- [Ahmadabadi, 1998] Ahmadabadi, M. N. (1998). A transmission electron microscope study of 1 pct MN ductile iron with different austempering treatments. *Metallurgical and Materials Transactions A*, 29A(9):2297–2306.
- [Amran et al., 2010] Amran, Y., Katsman, A., Schaaf, P., and Bamberger, M. (2010). Influence of copper addition and temperature on the kinetics of austempering in ductile iron. *Metallurgical Transactions B*, 41B:1052–1058.
- [Bahmani et al., 1997] Bahmani, M., Elliott, R., and Varahram, N. (1997). The austempering kinetics and mechanical properties of an austempered Cu-Ni-Mo-Mn alloyed ductile iron. *Journal of Materials Science*, 32:4783–4791.
- [Ōhira et al., 1990] Ōhira, G., Kusakawa, T., and Niyama, E., editors (1990). *Physical Metallurgy of Cast Iron IV: Proceedings of the Fourth International Symposium on the Physical Metallurgy of Cast Iron, Held in Tokyo, Japan, September 4-6, 1989*. Materials Research Society.
- [Batra et al., 2003a] Batra, U., Ray, S., and Prabhakar, S. (2003a). Austempering and austempered ductile iron microstructure in copper alloyed ductile iron. *Journal of Materials Engineering and Performance*, 12(4):426–429.
- [Batra et al., 2003b] Batra, U., Ray, S., and Prabhakar, S. (2003b). Effect of austenitization on austempering of copper alloyed ductile iron. *Journal of Materials Engineering and Performance*, 12(5):597–601.
- [Batra et al., 2004] Batra, U., Ray, S., and Prabhakar, S. (2004). The influence of nickel and copper on the austempering of ductile iron. *Journal of Materials Engineering and Performance*, 13(1):64–68.
- [Batra et al., 2005] Batra, U., Ray, S., and Prabhakar, S. (2005). Mathematical model for austenitization kinetics of ductile iron. *Journal of Materials Engineering and Performance*, 14(5):574–581.

## Bibliografía

- [Batra et al., 2007] Batra, U., Ray, S., and Prabhakar, S. (2007). Impact properties of copper-alloyed and nickel-copper alloyed ADI. *Journal of Materials Engineering and Performance*, 16(4):485–489.
- [Bhadeshia, 1981] Bhadeshia, H. (1981). Rationalisation of shear transformations in steels. *Acta Metallurgica*, 29:1117–1130.
- [Bhadeshia, 1982] Bhadeshia, H. (1982). Thermodynamic analysis of isothermal transformation diagrams. *Metal Science*, 16:159–165.
- [Bhadeshia, 1987] Bhadeshia, H. (1987). Diffusional and displacive transformations. *Scripta Metallurgica*, 21:1017–1022.
- [Bhadeshia, 2001] Bhadeshia, H. (2001). *Bainite in steels, 2nd ed.* IOM Communications Ltd, London.
- [Bhadeshia and Edmonds, 1980] Bhadeshia, H. and Edmonds, D. (1980). The mechanism of bainite formation in steels. *Acta Metallurgica*, 28:1265–1273.
- [Boccardo et al., 2016] Boccardo, A., Dardati, P., Celentano, D., Godoy, L., Górny, M., and Tyrała, E. (2016). Numerical simulation of austempering heat treatment of a ductile cast iron. *Metallurgical and Materials Transactions B*, 47(1):566–575.
- [Boeri, 1989] Boeri, R. (1989). *The solidification of ductile cast iron.* PhD thesis, University of British Columbia, Vancouver, Canada.
- [Bosnjak et al., 2001] Bosnjak, B., Radulovic, B., Pop-Tonev, K., and Asanovic, V. (2001). Influence of microalloying and heat treatment on the kinetics of bainitic reaction in austempered ductile iron. *Journal of Materials Engineering and Performance*, 10(2):203–211.
- [Brown and Hawkes, 1951] Brown, B. and Hawkes, M. (1951). . *AFS Transactions*, 59:181–196.
- [Carazo et al., 2012] Carazo, F., Dardati, P., Celentano, D., and Godoy, L. (2012). Thermo-metallurgical modeling of nodular cast iron cooling process. *Metallurgical Transactions B*, 43(6):1579–1595.
- [Carazo et al., 2014] Carazo, F., Giusti, S., Boccardo, A., and Godoy, L. (2014). Effective properties of nodular cast-iron: A multi-scale computational approach. *Computational Materials Science*, 82:378–390.
- [Carazo, 2012] Carazo, F. D. (2012). *Modelado termo-metalúrgico del enfriamiento de una fundición nodular.* PhD thesis, Universidad Nacional de Córdoba, Facultad de Ciencias Exactas, Físicas y Naturales, Córdoba Capital, Argentina.

- [Celentano, 1994] Celentano, D. (1994). *Un modelo termomecánico para problemas de solidificación de metales*. PhD thesis, Escuela Técnica Superior de Ingenieros de Caminos Canales y Puertos, U.P.C., Barcelona, España.
- [Celentano, 2001] Celentano, D. (2001). A large strain thermoviscoplastic formulation for the solidification of sg cast iron in a green sand mould. *International Journal of Plasticity*, 17:1623–1658.
- [Celentano, 2010] Celentano, D. (2010). Thermomechanical simulation and experimental validation of wire drawing processes. *Materials and Manufacturing Processes*, 25(7):546–556.
- [Celentano et al., 2013] Celentano, D., Dardati, P., Carazo, F., and Godoy, L. (2013). Thermomechanical-microstructural modelling of nodular cast iron solidification. *Materials Science and Technology*, 29(2):156–164.
- [Celentano et al., 2008] Celentano, D., Dardati, P., Godoy, L., and Boeri, R. (2008). Computational simulation of microstructure evolution during solidification of ductile cast iron. *International Journal of Cast Metals Research*, 21(6):416–426.
- [Celentano et al., 1994] Celentano, D., Oñate, E., and Oller, S. (1994). A temperature-based formulation for finite element analysis of generalized phase-change problems. *International Journal for Numerical Methods in Engineering*, 37:3441–3465.
- [Chan et al., 1997] Chan, K., Saltelli, A., and Tarantola, S. (1997). Sensitivity analysis of model output: variance-based methods make the difference. In Andradottir, S., Healy, K., Withers, D., and Nelson, B., editors, *Proceedings of the 29th conference on Winter simulation, Atlanta, GA, USA, December 7-10, 1997*, pages 261–268. ACM.
- [Chang, 1998] Chang, L. (1998). Carbon content of austenite in austempered ductile iron. *Scripta Materialia*, 39(1):35–38.
- [Chang, 2003] Chang, L. (2003). An analysis of retained austenite in austempered ductile iron. *Metallurgical and Materials Transactions A*, 34A:211–217.
- [Chang et al., 1991] Chang, S., Shangguan, D., and Stefanescu, D. M. (1991). Prediction of microstructural evolution in SG cast iron from solidification to room temperature. *AFS Transactions*, 99:531–541.
- [Chapra and Canale, 2010] Chapra, S. and Canale, R. (2010). *Numerical methods for engineers, 6th ed.* McGraw-Hill, New York.
- [Christien et al., 2013] Christien, F., Telling, M., and Knight, K. (2013). A comparison of dilatometry and in-situ neutron diffraction in tracking bulk phase transformations in a martensitic stainless steel. *Materials Characterization*, 82:50–57.

## Bibliografía

- [Cukier et al., 1973] Cukier, R., Fortuin, C., Schuler, K., Petschek, A., and Schaibly, J. (1973). Study of the sensitivity of coupled reaction systems to uncertainties in rate coefficients. I theory. *The Journal of Chemical Physics*, 59:3873–3878.
- [Dardati et al., 2006] Dardati, P., Godoy, L., and Celentano, D. (2006). Microstructural simulation of solidification process of spheroidal-graphite cast iron. *Journal of Applied Mechanics, Transactions ASME*, 73(6):977–983.
- [Dassault, 2010] Dassault (2010). *Simulia: Abaqus 6.10 documentation*. USA.
- [Fraś and Górny, 2010] Fraś, E. and Górny, M. (2010). Thin wall ductile and austempered iron castings. *Archives of Foundry Engineering*, 10(3):5–10.
- [Fraś et al., 2012] Fraś, E., Górny, M., Tyrała, E., and Lopez, H. (2012). Effect of nodule count on austenitising and austempering kinetics of ductile iron castings and mechanical properties of thin walled iron castings. *Materials Science and Technology*, 28(12):1391–1396.
- [Fredriksson and Svensson, 1984] Fredriksson, H. and Svensson, I. (1984). Computer simulation of the structure formed during solidification of cast iron. In *Proc. 3rd Int. Symp. on the Metallurgy of Cast Iron. Estocolmo, Suecia, agosto 29-31, 1984*, pages 273–284.
- [Garcia-Mateo and Bhadeshia, 2004] Garcia-Mateo, C. and Bhadeshia, H. (2004). Nucleation theory for high-carbon bainite. *Materials Science and Engineering A*, A378:289–292.
- [Garín and Mannheim, 2003] Garín, J. and Mannheim, R. (2003). Strain-induced martensite in ADI alloys. *Journal of Materials Processing Technology*, 143-144:347–351.
- [Gaude-Fugarolas and Jacques, 2006] Gaude-Fugarolas, D. and Jacques, P. (2006). A new physical model of the kinetics of the bainite transformation. *ISIJ International*, 46(5):712–717.
- [Ghergu et al., 2012] Ghergu, R. M., Sertucha, J., Thebault, Y., and Lacaze, J. (2012). Critical temperature range in standard and Ni-bearing spheroidal graphite cast iron. *ISIJ International*, 52(11):2036–2041.
- [Górny et al., 2014] Górny, M., Tyrała, E., and Lopez, H. (2014). Effect of copper and nickel on the transformation kinetics of austempered ductile iron. *Journal of Materials Engineering and Performance*, 23(10):3505–3510.
- [Grange and Stewart, 1945] Grange, R. and Stewart, H. (1945). The temperature range of martensite formation. *Transactions AIME*, 167:467–494.

- [Guzmán et al., 2013] Guzmán, D., Navea, L., Garín, J., Aguilar, C., and Guzmán, A. (2013). Study of the influence of Cu and Ni on the kinetics of strain-induced martensite in austempered ductile cast iron. *Revista de Metalurgia*, 49(3):213–222.
- [Homma and Saltelli, 1996] Homma, T. and Saltelli, A. (1996). Importance measures in global sensitivity analysis of model output. *Reliability Engineering and System Safety*, 52(1):1–17.
- [Hupalo et al., 2012] Hupalo, M., Ramos, D., Rabelo, A., and de Lima, N. (2012). Kinetic and microstructural aspects of incomplete bainite transformation in austempered ductile irons. *Revista Escola de Minas*, 65(2):217–224.
- [Johnson and Kovacs, 1978] Johnson, W. and Kovacs, B. (1978). The effect of additives on the eutectoid transformation of ductile iron. *Metallurgical and Materials Transactions A*, 9A(2):219–229.
- [Kapturkiewicz et al., 2003] Kapturkiewicz, W., Burbelko, A., Lelito, J., and Fraś, E. (2003). Modelling of ausferrite growth in ADI. *International Journal of Cast Metals Research*, 16(1-3):287–292.
- [Kapturkiewicz et al., 2005] Kapturkiewicz, W., Fraś, E., and Burbelko, A. A. (2005). Computer simulation of the austenitizing process in cast iron with pearlitic matrix. *Materials Science and Engineering A*, 413-414:352–357.
- [Khan and Bhadeshia, 1990] Khan, S. and Bhadeshia, H. (1990). Kinetics of martensite transformation in partially bainitic 300M steel. *Materials Science and Engineering A*, A129:257–272.
- [Kiani-Rashid, 2009] Kiani-Rashid, A. (2009). The bainite transformation and the carbide precipitation of 4.88% aluminium austempered ductile iron investigated using electron microscopy. *Journal of Alloys and Compounds*, 474:490–498.
- [Kochański et al., 2014] Kochański, A., Krzyńska, A., and T., R. (2014). High silicone austempered ductile iron. *Archives of Foundry Engineering*, 14(1):55–58.
- [Koistinen and Marburger, 1959] Koistinen, D. and Marburger, R. (1959). A general equation prescribing the extent of the austenite-martensite transformation in pure iron-carbon alloys and plain carbon steels. *Acta Metallurgica*, 7(1):59–60.
- [Kovacs, 1994] Kovacs, B. (1994). On the terminology and structure of ADI. *AFS Transactions*, 83:417–420.
- [Krzyńska and Kochański, 2014] Krzyńska, A. and Kochański, A. (2014). Properties and structure of high-silicone austempered ductile iron. *Archives of Foundry Engineering*, 14(2):91–94.

## Bibliografía

- [Kumar et al., 2011] Kumar, S., Gawai, D., Prasad, D., and Singh, K. (2011). Optimisation of structure-property of thin-wall austempered ductile iron. *Institute of Indian Foundry*, 57(12):29–42.
- [Lacaze and Gerval, 1998] Lacaze, J. and Gerval, V. (1998). Modelling of the eutectoid reaction in spheroidal graphite Fe-C-Si alloys. *ISIJ International*, 38(7):714–722.
- [Ławrynowicz and Dymski, 2007] Ławrynowicz, Z. and Dymski, S. (2007). Analysis of carbon diffusion during bainite transformation in ADI. *Archives of Foundry Engineering*, 7(3):87–92.
- [Ławrynowicz and Dymski, 2008] Ławrynowicz, Z. and Dymski, S. (2008). Analysis of carbon partitioning during ausferritic reaction in ADI. *Archives of Foundry Engineering*, 8(3):69–74.
- [Lin et al., 1995] Lin, B., Chen, E., and Lei, T. (1995). The effect of alloy elements on the microstructure and properties of austempered ductile irons. *Scripta Metallurgica et Materialia*, 32(9):1363–1367.
- [Liu and R., 1998] Liu, J. and R., E. (1998). Numerical modelling of the solidification of ductile iron. *Journal of Crystal Growth*, 191:261–267.
- [Matsuda and Bhadeshia, 2004] Matsuda, H. and Bhadeshia, H. (2004). Kinetics of the bainite transformation. *The Royal Society*, 460:1707–1722.
- [Meier et al., 2013] Meier, L., Hofmann, M., Saal, P., Volk, W., and Hoffmann, H. (2013). In-situ measurement of phase transformation kinetics in austempered ductile iron. *Materials Characterization*, 85:124–133.
- [Mendez et al., 2015] Mendez, S., de la Torre, U., Larranaga, P., Suarez, R., and Stefanescu, D. (2015). New as-cast ductile iron raises bar for properties. *Metal Casting Design & Purchasing*, 17(5):39–44.
- [Miettinen, 1997] Miettinen, J. (1997). Calculation of solidification-related thermophysical properties for steels. *Metallurgical and Materials Transactions B*, 28B:281–297.
- [Moncada and Sikora, 1996] Moncada, O. and Sikora, J. (1996). Dimensional change in austempered ductile iron. *AFS Transactions*, 104:577–580.
- [Nofal et al., 2007] Nofal, A., Nasr El-din, H., and Ibrahim, M. M. (2007). Thermomechanical treatment of austempered ductile iron. *International Journal of Cast Metals Research*, 20(2):47–52.
- [Olson and Cohen, 1975] Olson, G. and Cohen, M. (1975). Kinetics of strain-induced martensitic nucleation. *Metallurgical and Materials Transactions A*, 6A:791–795.

- [Putatunda and Gadicherla, 1999] Putatunda, S. and Gadicherla, P. (1999). Influence of austenitizing temperature on fracture toughness of a low manganese austempered ductile iron (ADI) with ferritic as cast structure. *Materials Science and Engineering A*, 268(1-2):15–31.
- [Putman and Thomson, 2003] Putman, D. and Thomson, R. (2003). Microstructural and mechanical property modelling of austempered ductile iron. *International Journal of Cast Metals Research*, 16:191–196.
- [Rammo and Abdulah, 2006] Rammo, N. and Abdulah, O. (2006). A model for the prediction of lattice parameters of iron-carbon austenite and martensite. *Journal of Alloys and Compounds*, 420:117–120.
- [Rees and Bhadeshia, 1992a] Rees, G. and Bhadeshia, H. (1992a). Bainite transformation kinetics part 1 modified model. *Materials Science and Technology*, 8:985–993.
- [Rees and Bhadeshia, 1992b] Rees, G. and Bhadeshia, H. (1992b). Bainite transformation kinetics part 2 non-uniform distribution of carbon. *Materials Science and Technology*, 8:994–996.
- [Rodriguez et al., 2015] Rodriguez, F., Dardati, P., Celentano, D., and L.A., G. (2015). Derivation of nodular cast iron elastic properties via computational micromechanics. *Revista Internacional de Metodos Numericos para Calculo y Diseno en Ingenieria*, 31(2):91–105.
- [Rollason, 1973] Rollason, E. (1973). *Metallurgy for Engineers, 4th ed.* Edward Arnold Ltd.
- [Saltelli et al., 2010] Saltelli, A., Annoni, P., Azzini, I., Campolongo, F., Ratto, M., and Tarantola, S. (2010). Variance based sensitivity analysis of model output. Design and estimator for the total sensitivity index. *Computer Physics Communications*, 181(2):259–270.
- [Saltelli et al., 2008] Saltelli, A., Ratto, M., Andres, T., Campolongo, F., Cariboni, J., Gatelli, D., Saisana, M., and Tarantola, S. (2008). *Global Sensitivity Analysis: The Primer.* Wiley, England.
- [Santofimia et al., 2006] Santofimia, M., Caballero, F., Capdevila, C., García-Mateo, C., and García de Andrés, C. (2006). New model for the overall transformation kinetics of bainite. part 1: the model. *Materials Transactions, JIM*, 47(10):2465–2472.
- [Shin et al., 2001] Shin, H. C., Ha, T. K., and Chang, Y. W. (2001). Kinetics of deformation induced martensitic transformation in a 304 stainless steel. *Scripta Materialia*, 45:823–829.

## Bibliografía

- [Sikora and Boeri, 1999] Sikora, J. and Boeri, R. (1999). Solid state transformations in ductile iron - influence of prior austenite matrix microstructure. *International Journal of Cast Metals Research*, 11:395–400.
- [Sobol', 1993] Sobol', I. (1993). Sensitivity analysis for non-linear mathematical models. *Mathematical Modelling and Computational Experiment*, 1:407–414.
- [Sobol' et al., 1992] Sobol', I., Turchaninov, V., Levitan, Y., and Shukhman, B. (1992). Quasirandom sequence generators. Keldysh Institute of Applied Mathematics, Russian Academy of Sciences, Moscow.
- [Sohi et al., 2010] Sohi, M., Ahmadabadi, M., Vahdat, A., and Amirsadeghi, A. (2010). Evaluation of the role of alloying elements in austemperability of heavy section ductile iron. *Advanced Materials Research*, 83-86:481–487.
- [Sosa et al., 2004] Sosa, A., Echeverría, M., and Moncada, O. (2004). Machining and heat treatment effects on distortion and residual stresses in an industrial application of ADI. *ISIJ International*, 44(7):1195–1200.
- [Sosa et al., 2009] Sosa, A., Echeverría, M., and Moncada, O. (2009). Influence of nodule count on residual stresses and distortion in thin wall ductile iron plates of different matrices. *Journal of Materials Processing Technology*, 209:5545–5551.
- [Stefanescu, 2009] Stefanescu, D. (2009). *Science and engineering of casting solidification*. Springer, USA.
- [Stefanescu and Kanetkar, 1985] Stefanescu, D. and Kanetkar, C. (1985). Computer modeling of the solidification of eutectic alloys: the case of cast iron. In Srolovitz, D., editor, *Computer Simulation of Microstructural Evolution. Held at the 1985 Fall Meeting of the Metallurgical Society; Toronto, Ont, Can*, pages 171–188.
- [Su et al., 1985] Su, K., Ohnaka, I., Yamauchi, I., and Fukusako, T. (1985). Computer simulation of solidification of nodular cast iron. *Materials Research Society Symposia Proceedings*, 34:181–189.
- [Takahashi and Bhadeshia, 1990] Takahashi, M. and Bhadeshia, H. (1990). Model for transition from upper to lower bainite. *Materials Science and Technology*, 6:592–603.
- [Taran et al., 1997] Taran, Y., Uzlov, K., and Kutsov, A. (1997). The bainite reaction kinetics in austempered ductile iron. *Journal de Physique IV*, 7(C5):429–434.
- [Thomson et al., 2000] Thomson, R., James, J., and Putman, D. (2000). Modelling microstructural evolution and mechanical properties of austempered ductile iron. *Materials Science and Technology*, 16:1412–1419.
- [Tohr, 1998] Tohr, A. (1998). *ASM Handbook, Volume 4, Heat Treating*. ASM International, USA.

- [Trudel and Gagné, 1997] Trudel, A. and Gagné, M. (1997). Effect of composition and heat treatment parameters on the characteristics of austempered ductile irons. *Canadian Metallurgical Quarterly*, 36(5):289–298.
- [Tsang et al., 2005] Tsang, D., Marsden, B., Fok, S., and Hall, G. (2005). Graphite thermal expansion relationship for different temperature ranges. *Carbon*, 43:2902–2906.
- [Van Bohemen, 2013] Van Bohemen, S. (2013). The nonlinear lattice expansion of iron alloys in the range 100-1600 K. *Scripta Materialia*, 69:315–318.
- [Venugopalan, 1990a] Venugopalan, D. (1990a). Computer modeling of ferrite and pearlite formation in ductile iron. In [Ōhira et al., 1990], pages 271–278.
- [Venugopalan, 1990b] Venugopalan, D. (1990b). A kinetic model of the  $\gamma \rightarrow \alpha + \text{Gr}$  eutectoid transformation in spheroidal graphite cast irons. *Metallurgical and Materials Transactions A*, 21A:913–918.
- [Verhoeven et al., 1990] Verhoeven, J., El Nagar, A., El Sarnagawa, B., and Cornwell, D. (1990). A study of austempered ductile cast iron. In [Ōhira et al., 1990], pages 387–398.
- [Wenzhen and Baicheng, 1996] Wenzhen, L. and Baicheng, L. (1996). Microstructure simulation and property prediction of spheroidal graphite iron casting. In *62nd World Foundry Congress, Philadelphia, EE.UU. 1996*.
- [Yang and Putatunda, 2005] Yang, J. and Putatunda, S. (2005). Effect of microstructure on abrasion wear behavior of austempered ductile cast iron (ADI) processed by a novel two-step austempering process. *Materials Science and Engineering A*, 406:217–228.
- [Yescas, 2001] Yescas, M. (2001). *Modelling the microstructure and mechanical properties of austempered ductile iron*. PhD thesis, University of Cambridge, Cambridge, UK.
- [Yescas and Bhadeshia, 2002] Yescas, M. and Bhadeshia, H. (2002). Model for the maximum fraction of retained austenite in austempered ductile cast iron. *Materials Science and Engineering A*, 333:60–66.
- [Yescas et al., 2001] Yescas, M., Bhadeshia, H., and MacKay, D. (2001). Estimation of the amount of retained austenite in austempered ductile irons using neural networks. *Materials Science and Engineering A*, 311:162–173.
- [Yoo et al., 1999] Yoo, S., Moeinipour, K., Ludwig, A., and Sahm, P. (1999). Numerical simulation and experimental results of in situ heat treated austempered ductile iron. *International Journal of Cast Metals Research*, 11:483–488.

## *Bibliografía*

- [Zhao and Liu, 2001] Zhao, H. and Liu, B. (2001). Modeling of stable and metastable eutectic transformation of spheroidal graphite iron casting. *ISIJ International*, 41(9):986–991.

# Apéndice



# Apéndice A

## Propiedades de la fundición de hierro nodular

### A.1. Densidades de las fases

A continuación se presentan las densidades de las fases que componen a la fundición de hierro nodular.

Las densidades de la ferrita, la austenita y la cementita, en  $kg/m^3$ , son calculadas con las ecuaciones presentadas en la referencia [Miettinen, 1997]:

$$\begin{aligned} \rho_{\alpha} = & 7875,96 - 0,297T - 5,62x10^{-5}T^2 + (-206,35 + 0,00778T \\ & + 1,472x10^{-6}T^2)C_{\alpha} + (-8,58 + 1,229x10^{-3}T + 0,852x10^{-7}T^2 \\ & + 0,018367Cr_{\alpha})Cr_{\alpha} + (-0,22 - 0,47x10^{-3}T - 1,855x10^{-7}T^2 \\ & + 0,104608Ni_{\alpha})Ni_{\alpha} - 36,86Si_{\alpha} - 7,24Mn_{\alpha} + 30,78Mo_{\alpha} \end{aligned} \quad (A.1)$$

$$\begin{aligned} \rho_{\gamma} = & 8099,79 - 0,506T + (-118,26 + 0,00739T)C_{\gamma} \\ & + (-7,59 + 3,422x10^{-3}T - 5,388x10^{-7}T^2 - 0,014271Cr_{\gamma})Cr_{\gamma} \\ & + (1,54 - 2,267x10^{-3}T - 11,26x10^{-7}T^2 + 0,062642Ni_{\gamma})Ni_{\gamma} \\ & - 68,24Si_{\gamma} - 6,01Mn_{\gamma} + 12,45Mo_{\gamma} \end{aligned} \quad (A.2)$$

$$\rho_{\theta} = 7686,45 - 0,0663T - 3,12x10^{-4}T^2 \quad (A.3)$$

donde  $C_i$ ,  $Cr_i$ ,  $Ni_i$ ,  $Si_i$ ,  $Mn_i$  y  $Mo_i$  son las concentraciones de carbono, cromo, níquel, silicio, manganeso y molibdeno, respectivamente, con  $i = \alpha$  y  $\gamma$ . Las concentraciones son en  $\%$ peso y la temperatura  $T$  se expresa en  $^{\circ}C$ .

La colonia de perlita esta formada por láminas de ferrita y cementita. Por tal motivo, la densidad de la perlita puede evaluarse con la siguiente ecuación:

Apéndice A. Propiedades de la fundición de hierro nodular

$$\rho_p = f_{\theta/p}\rho_\theta + (1 - f_{\theta/p})\rho_\alpha \quad (\text{A.4})$$

donde  $f_{\theta/p}$  es la fracción de volumen de la cementita respecto del volumen de perlita.

La densidad del grafito, en  $kg/m^3$ , es calcula a través de su coeficiente de expansión térmica secante  $\alpha_{Gr}^s$ :

$$\rho_{Gr} = \frac{\rho_{Gr_o}}{1 + 3\alpha_{Gr}^s(T - T_o)} \quad (\text{A.5})$$

donde  $\alpha_{Gr}^s$ , en  $1/^\circ C$ , es calculado en función de la temperatura  $T$ , en  $^\circ C$ , utilizando la ecuación presentada en la referencia [Tsang et al., 2005]:

$$\begin{aligned} \alpha_{Gr}^s = & 4,06x10^{-6}(0,853157 + 4,26564x10^{-4}T \\ & - 1,42849x10^{-7}T^2) \end{aligned} \quad (\text{A.6})$$

La densidad de la martensita, en  $kg/m^3$ , es calculada a través de la densidad de su celda atómica:

$$\rho_m = cu \frac{mc_m}{vc_m} \quad (\text{A.7})$$

donde  $mc_m = 2ma_{Fe}$  es la masa de la celda unidad de la martensita (igual a dos veces la masa del átomo de hierro),  $vc_m = ap^2cp$  es el volumen de la celda unidad que depende de sus dos parámetros de red ( $ap$  y  $cp$ ) y  $cu$  es una constante utilizada para hacer cambios en la unidad de la densidad.

Los parámetros de red de la celda unidad de la martensita dependen de la temperatura y de la concentración de carbono. Cuando la concentración de carbono es distinta de cero, la celda unidad es tetragonal centrada en el cuerpo; mientras que si es igual a cero, la celda es cúbica centrada en el cuerpo con  $ap = cp$ . Los parámetros de red, en función de la temperatura  $T$ , en  $^\circ C$ , y de la concentración de carbono, son calculados con el modelo propuesto en la referencia [Rammo and Abdulah, 2006]:

$$ap = [1 + (T - T_o)(fx_{Fe}\alpha_m^s + fx_C\alpha_c^s)] \left\{ \frac{4r_{Fe}}{\sqrt{3}} - x_C \left[ \frac{4r_{Fe}/\sqrt{3} - \sqrt{2}(r_{Fe} + r_C)}{4x10} \right] \right\} \quad (\text{A.8})$$

$$cp = [1 + (T - T_o)(fx_{Fe}\alpha_m^s + fx_C\alpha_c^s)] \left\{ \frac{4r_{Fe}}{\sqrt{3}} + x_C \left[ \frac{2(r_{Fe} + r_C) - 4r_{Fe}/\sqrt{3}}{4x10} \right] \right\} \quad (\text{A.9})$$

donde  $r_{Fe}$  y  $r_C$  son los radios atómicos del hierro y del carbono, respectivamente,  $fx_{Fe}$  y  $fx_C$  son las fracciones atómicas de hierro y de carbono en la austenita, y  $x_C$  es el número de átomos de carbono cada 100 átomos de hierro. Por otro lado, el

## A.2. Concentraciones de carbono de las fases

coeficiente de expansión térmica secante del carbono ( $\alpha_c^s$ ) es calculado con la ecuación A.6 y el coeficiente de expansión térmica secante de la martensita sin carbono ( $\alpha_m^s$ ) es calculado en función de la temperatura  $T$ , en  $^{\circ}C$ , con la siguiente ecuación la cual fue desarrollada en esta tesis tomando como base el trabajo presentado por Van Bohemen [Van Bohemen, 2013] para el cálculo de la expansión térmica de la ferrita:

$$\alpha_m^s = B_\alpha \left\{ 1 + \frac{\Theta_D^\alpha}{(T - T_o)} \left[ \exp \left( -\frac{T + 273}{\Theta_D^\alpha} \right) - \exp \left( -\frac{T_o + 273}{\Theta_D^\alpha} \right) \right] \right\} \quad (A.10)$$

donde  $B_\alpha = 1,78x10^{-5}$  es una constante y  $\Theta_D^\alpha = 305K$  es la temperatura de Debye para la ferrita.

## A.2. Concentraciones de carbono de las fases

Las concentraciones de carbono de equilibrio  $c_{\gamma/\alpha}$  y  $c_{\alpha/\gamma}$ , en  $\%peso$ , son evaluadas utilizando las ecuaciones propuestas por Lacaze *et al.* [Lacaze and Gerval, 1998], en las cuales la temperatura  $T$  se expresa en  $^{\circ}C$ :

$$c_{\gamma/\alpha} = 18,76 - 4,112x10^{-2}T + 2,26x10^{-5}T^2 + 0,125Si \quad (A.11)$$

$$c_{\alpha/\gamma} = 6,7x10^{-2} - 5x10^{-8}T^2 - 2,8x10^{-5}T + (1,2x10^{-8}T^2 - 4,5x10^{-3})Si \quad (A.12)$$

La concentración de carbono de equilibrio  $c_{\gamma/Gr}$  y la concentración de carbono  $c_{\gamma_{T_o'}}$ , en  $\%peso$ , son calculadas con las ecuaciones presentadas por Chang [Chang, 2003], en las cuales la temperatura  $T$  se expresa en  $^{\circ}C$ :

$$c_{\gamma_{T_o'}} = 3,072 - 0,0016T - 0,24Si - 0,161Mn - 0,115Ni + 0,25Cu + 0,06Mo + 2,69Cr \quad (A.13)$$

$$c_{\gamma/Gr} = 0,335x10^{-3}T + 1,61x10^{-6}T^2 + 0,006Mn - 0,11Si - 0,07Ni + 0,014Cu - 0,3Mo - 0,435 \quad (A.14)$$

Como alternativa se utiliza la ecuación presentada por Boeri [Boeri, 1989] para calcular la concentración de carbono de equilibrio  $c_{\gamma/Gr}$ , en  $\%peso$ , en función de la temperatura  $T$ , en  $^{\circ}C$ , que al igual que las utilizadas para calcular  $c_{\gamma/\alpha}$  y  $c_{\alpha/\gamma}$  sólo tiene en cuenta la influencia de la concentración de silicio:

$$c_{\gamma/Gr} = (T - 1154,6 - 6,5Si) \frac{(1,5 - 0,216Si)}{(354,6 + 6,5Si)} + 2,1 - 0,216Si \quad (A.15)$$

## Apéndice A. Propiedades de la fundición de hierro nodular

La concentración de carbono de equilibrio  $c_{\gamma/\theta}$ , en %*peso*, es calculada con la ecuación propuesta por Kapturkiewicz *et al.* [Kapturkiewicz *et al.*, 2005], en la cual la temperatura  $T$  se expresa en  $^{\circ}C$ :

$$c_{\gamma/\theta} = \frac{T - 485,08}{314,18} \quad (\text{A.16})$$

### A.3. Coeficientes de difusión de carbono en las fases

Los coeficientes de difusión de carbono de la ferrita  $D_{\alpha}$  y de la austenita  $D_{\gamma}$ , en  $m^2/s$ , son calculados con las expresiones presentadas por Kapturkiewicz *et al.* [Kapturkiewicz *et al.*, 2003], en las cuales la temperatura  $T$  se expresa en  $^{\circ}C$ :

$$D_{\alpha} = 7,9x10^{-7} \exp \left[ \frac{-7,58x10^4}{8,314472(T + 273)} \right] \quad (\text{A.17})$$

$$D_{\gamma} = 1,67x10^{-6} \exp \left[ \frac{-1,2x10^5}{8,314472(T + 273)} \right] \quad (\text{A.18})$$

### A.4. Temperaturas

Las temperaturas mayor ( $T_{\alpha}^0$ ) y menor ( $T_{\alpha}$ ) del campo trifásico del sistema estable *Fe-C-Si* son calculadas, en  $^{\circ}C$ , utilizando las ecuaciones presentadas por Ghergu *et al.* [Ghergu *et al.*, 2012], estando la concentración de los elementos de aleación de la fundición en %*peso*:

$$T_{\alpha}^0 = 739 + 31,5Si - 7,7Cu - 18,7Mn + 3,3Mo - 10,7Cr - 26Ni \quad (\text{A.19})$$

$$T_{\alpha} = 739 + 18,4Si + 2Si^2 - 14Cu - 45Mn + 2Mo - 24Cr - 27,5Ni \quad (\text{A.20})$$

Las temperaturas mayor ( $T_p^0$ ) y menor ( $T_p$ ) del campo trifásico del sistema metaestable *Fe-C-Si* son calculadas, en  $^{\circ}C$ , utilizando las ecuaciones presentadas por Ghergu *et al.* [Ghergu *et al.*, 2012], estando la concentración de los elementos de aleación de la fundición en %*peso*:

$$T_p^0 = 727 + 30,07Si - 1,98Si^2 - 10,7Cu - 13,7Mn + 9,3Mo + 24,3Cr - 12Ni \quad (\text{A.21})$$

## A.5. Propiedades térmicas y mecánicas

$$T_p = 727 + 21,6Si + 0,023Si^2 + 8Mo + 13Cr - 21Cu - 25Mn - 33Ni \quad (\text{A.22})$$

La temperatura de comienzo de la transformación ausferrítica es evaluada, en  $^{\circ}C$ , utilizando la ecuación presentada en la referencia [Bhadeshia, 2001], estando la concentración de los elementos de aleación de la austenita en  $\%peso$ :

$$T_{AS} = 830 - 270c_{\gamma_i} - 90Mn - 37Ni - 70Cr - 83 \quad (\text{A.23})$$

La temperatura de comienzo de la transformación martensítica para ambas regiones de austenita es evaluada, en  $^{\circ}C$ , utilizando la ecuación presentada en la referencia [Grange and Stewart, 1945], estando la concentración de los elementos de aleación de la austenita en  $\%peso$ :

$$T_{MS_{reg}} = 538 - 361c_{\gamma_{reg}} - 38,9Mn - 38,9Cr - 19,4Ni - 27,8Mo \quad (\text{A.24})$$

donde  $c_{\gamma_{reg}}$  es la concentración de carbono en la austenita para las regiones de bloques y de halos.

## A.5. Propiedades térmicas y mecánicas

Temperatura [ $^{\circ}C$ ]	Conductividad [ $W/(m^{\circ}C)$ ]	Calor específico [ $J/(kg^{\circ}C)$ ]
20	44.1	500
280	44.1	612
420	40.9	672
560	37.1	732
700	33.6	750
840	28.1	758
980	22.5	786
Calor latente [ $J/kg$ ]	$L_{p \rightarrow \gamma} = 3x10^4$ $L_{\gamma \rightarrow \alpha} = 1,2x10^4$	$L_{\alpha \rightarrow \gamma} = 1,2x10^4$

Tabla A.1: Propiedades térmicas de la fundición de hierro nodular [Kapturkiewicz et al., 2005, Celentano et al., 2013, Lacaze and Gerval, 1998].

Apéndice A. Propiedades de la fundición de hierro nodular

Temperatura [°C]	Módulo de Young [MPa]	Tensión de fluencia [MPa]
20	163471	260
100	163113	255
200	160174	250
300	151650	230
400	135276	210
500	110898	135
600	81386	60
700	52021	50
720	46668	48
750	44267	45
770	43788	42
800	44356	40
830	45935	37
850	42935	35
900	35435	30
1000	28435	20
Coefficiente de Poisson	$\nu=0.33$	
Param. endurecimiento	$A^p=300MPa$	$n^p=0.22$

Tabla A.2: Propiedades mecánicas de la fundición de hierro nodular [Celentano et al., 2013].

## Apéndice B

# Ajuste del modelo de cambio de fase de la transformación ausferrítica

Los parámetros del modelo de la transformación ausferrítica  $k_1$  y  $k_2$  se obtienen mediante el ajuste de los resultados del modelo con los resultados experimentales. Para realizar este ajuste se utiliza un método iterativo basado en mínimos cuadrados, cuyo diagrama de flujo se encuentra en la figura B.1.

En cada iteración  $it$  se simula el tratamiento térmico de austemperizado para distintos valores de los parámetros  $k_{1_{it}}$  y  $k_{2_{it}}$ . Los valores de estos parámetros varían en el siguiente rango  $k_{1_{min_{it}}} \leq k_{1_{it}} \leq k_{1_{max_{it}}}$  y  $k_{2_{min_{it}}} \leq k_{2_{it}} \leq k_{2_{max_{it}}}$ . Estos rangos tienen  $nk1$  y  $nk2$  intervalos, con un valor de  $\Delta k_{1_{it}} = (k_{1_{max_{it}}} - k_{1_{min_{it}}})/nk1$  y  $\Delta k_{2_{it}} = (k_{2_{max_{it}}} - k_{2_{min_{it}}})/nk2$ .

Los parámetros  $k_1$  y  $k_2$  deben ser ajustados de tal manera que sus valores no dependan de conteo de nódulos de grafito ni de la temperatura de austemperizado. Para lograrlo, para cada  $k_{1_{it}}$  y  $k_{2_{it}}$  se simulan  $nens$  tratamientos térmicos, teniendo cada uno de ellos distintas combinaciones de valores de la temperatura de austemperizado y de conteo de nódulos de grafito. Para una combinación dada de  $k_{1_{it}}$  y  $k_{2_{it}}$ , la suma de las diferencias al cuadrado se calcula con la siguiente ecuación:

$$sdc_{it_{ij}} = \sum_{k=1}^{nens} \left[ \sum_{l=1}^{nres} (r_{m_l} - r_{e_l})^2 \right]_k \quad (B.1)$$

donde  $nens$  es el número de configuraciones de ensayos considerados para realizar el ajuste,  $nres$  es el número de resultados considerados para realizar el ajuste, y  $r_{m_l}$  y  $r_{e_l}$  son los resultados del modelo y del experimento, respectivamente. El número de resultados  $nres$  tiene que ser lo suficientemente elevado como para que el modelo pueda ser ajustado correctamente para todo el desarrollo de la transformación ausferrítica.

Los valores óptimos de los parámetros resultantes de cada iteración ( $k_{1_{it}}$  y  $k_{2_{it}}$ ) se determinan considerando que éstas minimizan a  $sdc_{it_{ij}}$ . Una vez encontrados los parámetros óptimos, se define el rango de variación de los parámetros para la próxima iteración de la siguiente manera  $k_{1_{max_{it+1}}} = k_{1_{it}} + \Delta k_{1_{it}}$ ,  $k_{1_{min_{it+1}}} = k_{1_{it}} - \Delta k_{1_{it}}$ ,

Apéndice B. Ajuste del modelo de cambio de fase de la TA

$k_{2_{max_{it+1}}} = k_{2_{it}} + \Delta k_{2_{it}}$  y  $k_{2_{min_{it+1}}} = k_{2_{it}} - \Delta k_{2_{it}}$ . Es importante remarcar que en cada iteración se va acotando la región de búsqueda del valor óptimo de cada parámetro. El número máximo de iteraciones  $it_{max}$  tiene que ser lo suficientemente elevado para asegurar que los valores de los parámetros obtenidos estén en convergencia.

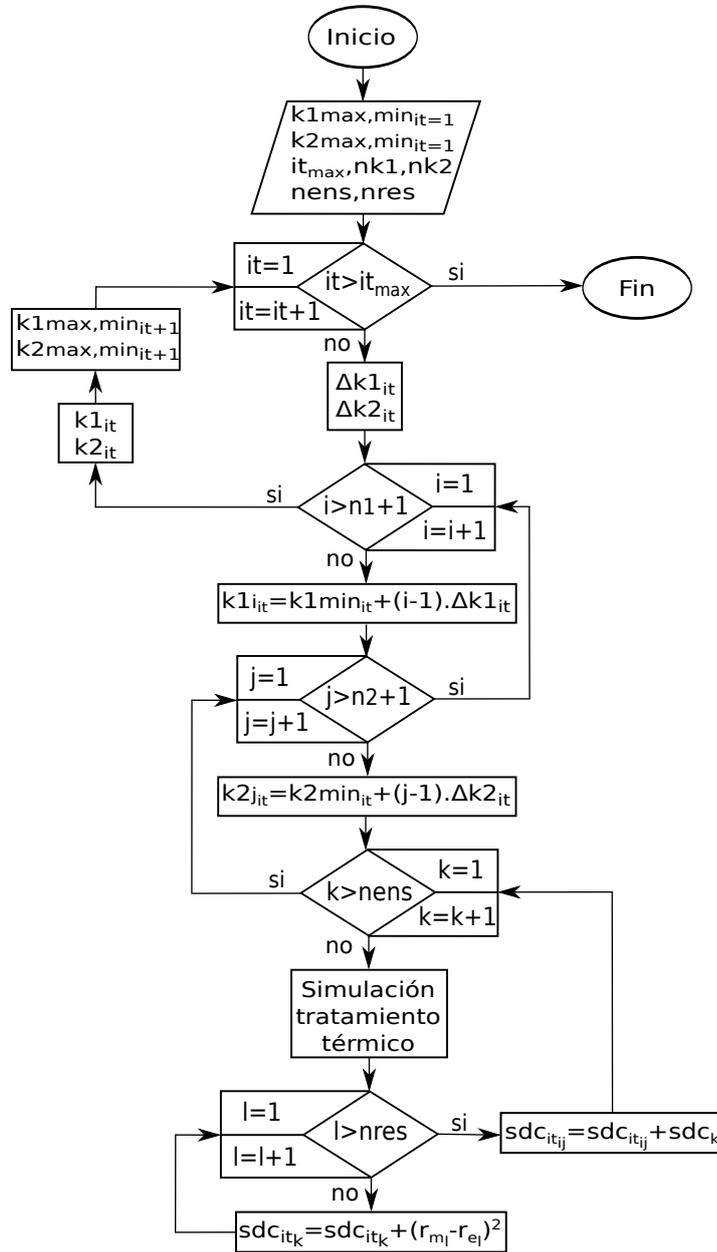


Figura B.1: Diagrama de flujo del algoritmo propuesto para calcular los parámetros del modelo de la transformación ausferrítica  $k_1$  y  $k_2$ .

# Apéndice C

## Implementación del modelo del tratamiento térmico de austemperizado en Abaqus

### C.1. Descripción general de la implementación

El tratamiento térmico de austemperizado de una fundición de hierro nodular puede ser simulado utilizando el programa de elementos finitos comercial Abaqus. Para ello es necesario implementar el modelo metalúrgico propuesto en esta tesis en dicho programa acoplándolo a su modelo *coupled temp-displacement* mediante el uso de subrutinas de usuario.

El modelo *coupled temp-displacement* resuelve las ecuaciones de los problemas térmico y mecánico simultáneamente. El acoplamiento no lineal entre ambos problemas se resuelve utilizando el método de Newton [Dassault, 2010], al igual que en el programa de elementos finitos académico (ver ecuación 4.16). Las ecuaciones utilizadas para tener en cuenta las interacciones entre problemas se describen a continuación.

La modificación de la historia térmica debida a los cambios de fase se tiene en cuenta mediante el flujo de calor  $r$  generado o absorbido en tales casos (energía térmica por unidad de tiempo y volumen). Este flujo es calculado en cada punto de integración mediante la siguiente ecuación:

$$r = \rho(L_{\alpha \rightarrow \gamma} \dot{f}_{\gamma s} + L_{p \rightarrow \gamma} \dot{f}_{\gamma m} + L_{\gamma \rightarrow \alpha} \dot{f}_{\alpha p}) \quad (\text{C.1})$$

El flujo de calor es introducido al programa mediante la subrutina de usuario *HETVAL*, en la cual  $FLUX(1) = r$ .

El modelo constitutivo utilizado para la fundición de hierro nodular en el problema mecánico es el elastoplástico perfecto. El módulo de elasticidad y la tensión de fluencia son introducidos al programa como dependientes de la temperatura.

Las deformaciones debidas a los cambios de temperatura y de fase se tienen en cuenta mediante el denominado incremento de deformación térmica. Considerando una

## Apéndice C. Implementación del modelo del TTA en Abaqus

deformación macroscópica isotrópica, el tensor de incremento de la deformación térmica es calculado en cada punto de integración utilizando el modelo propuesto por Christien *et al.* [Christien *et al.*, 2013], cuya ecuación es la siguiente:

$$\Delta\epsilon^{th} = \frac{\rho_o^{mic}}{3} \left( \frac{\rho_{t-\Delta t}^{mic} - \rho^{mic}}{\rho_{t-\Delta t}^{mic} \rho^{mic}} \right) \mathbf{1} \quad (C.2)$$

donde  $\rho_o^{mic}$ ,  $\rho_{t-\Delta t}^{mic}$  y  $\rho^{mic}$  son las densidades macroscópica del material (teniendo en cuenta su microestructura) al comienzo del tratamiento térmico, para un tiempo  $t - \Delta t$  y para un tiempo  $t$ , respectivamente. Además,  $\mathbf{1}$  es el tensor unitario.

Este tensor de deformación es introducido al programa mediante la subrutina de usuario *UEXPAN*, en la cual, debido a que la deformación es isotrópica,  $EXPAN(1) = \Delta\epsilon_{11}^{th}$ .

La implementación del modelo metalúrgico en Abaqus se realiza mediante la subrutina de usuario *USDFLD*. A lo fines de simplificar la estructura de la misma se introduce una subrutina por cada modelo de cambio de fase. Como se observa en el diagrama de flujo de la figura 4.3, es necesario contar con el valor de la temperatura dentro de la subrutina *USDFLD*. Como la temperatura no es una variable de entrada de esta subrutina, esta variable se obtiene utilizando la subrutina de usuario *GETVRM*.

Las variables del modelo metalúrgico son almacenadas en el arreglo *STATEV*. Además, este arreglo permite enviar información del modelo metalúrgico a las subrutinas *UEXPAN* y *HETVAL*. Las variables metalúrgicas son inicializadas, en sus valores correspondientes, utilizando la subrutina de usuario *SDVINI*. En esta subrutina se introdujeron subrutinas destinadas al cálculo de los valores iniciales de algunas de las variables. Para controlar la correcta asignación de los valores de determinadas variables metalúrgicas, se utiliza la subrutina de usuario *STDB\_ABQERR*. En el caso de una asignación incorrecta, esta subrutina detiene la simulación y genera un mensaje de error en el archivo \*.dat.

## C.2. Entrada de datos

Los datos de entrada para el modelo térmico y mecánico se introducen mediante el archivo \*.inp de Abaqus. Los datos de entrada para el modelo metalúrgico se introducen mediante un archivo denominado parameters.input, que se incluye en las subrutinas utilizadas para la implementación del modelo metalúrgico y para la implementación de las interacciones entre los problemas térmico, mecánico y metalúrgico.

A continuación se presenta el archivo de entrada del modelo metalúrgico utilizado para el caso de estudio presentado en el Capítulo 7.

```
REAL*8,PARAMETER ::  
c- ambient temperatures [°C]  
  .      Tamb=20.D0
```

```

c- chemical composition [wt%]
.   ,C=3.48
.   ,Mn=0.22
.   ,Cr=0.05
.   ,Ni=0.016
.   ,Cu=0.6
.   ,Ti=0.04
.   ,Mo=0.03
.   ,Sn=0.0079
.   ,V=0.012
.   ,Al=0.02
.   ,Si=2.028

c- initial microstructure (matrix)
.   ,vfFini=0.40   ! ferrite
.   ,vfPini=0.60   ! perlite

c- initial microstructure feature
.   ,eip=0.5E-5    ! [m]
.   ,denvngr=5254  ! [nodules/mm3]

c- latent heat [J/kg]
.   ,hlf=1.2E4     ! ferrite
.   ,hlp=3.E4      ! pearlite
.   ,hlfp=1.2E4    ! ferrite platele

c- ausferritic model
.   ,ck4=8.E15     ! k1 or k4
.   ,ck5=4.7E3     ! k2 or k5 [J/mol]

c- martensitic model
.   ,c2=0.006      ! martensitic parameter

```

### C.3. Subrutinas desarrolladas

La implementación del modelo metalúrgico y de las interacciones entre los modelos térmico, mecánico y metalúrgico, se realizó en Abaqus mediante subrutinas de usuario propias del programa y subrutinas aquí propuestas.

Las subrutinas utilizadas son las siguientes:

- STATEV: inicia las variables utilizadas en el modelo.
- USDFLD: resuelve los modelos de cambio de fase.
- HETVAL: calcula el calor latente de los cambios de fase.
- UEXPAN: calcula los cambios de volumen generados por los cambios de temperatura y de fase.
- BLOARRSIZE: dimensiona el arreglo en el cual se almacenan las variables del modelo.
- INIDATA: calcula los valores iniciales de algunas variables del modelo.

## Apéndice C. Implementación del modelo del TTA en Abaqus

- SGMAXBHA: calcula la máxima energía libre disponible para la nucleación de las subunidades de ferrita.
- DENSITY: calcula la densidad de las fases.
- SOLSOL1: resuelve el modelo de cambio de fase para la transformación eutectoide inversa y para el proceso de homogeneización de la concentración de carbono en la austenita.
- SOLSOL2: resuelve el modelo de cambio de fase para la transformación ausferrítica.
- SOLSOL3: resuelve el modelo de cambio de fase para la transformación martensítica.

A continuación se encuentra el código fuente, en lenguaje fortran, de las subrutinas mencionadas:

```

CCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCC
C
C      Initialization of variables
C
CCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCC
C
C
C
CCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCC
C      author: A.D. Boccardo
C      date: 06-2016
CCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCC

      SUBROUTINE SDVINI (STATEV , COORDS , NSTATV , NCRDS , NOEL , NPT ,
1      LAYER , KSPT)
      IMPLICIT INTEGER (i , j , k , l , m , n)
      INCLUDE 'ABA_PARAM.INC'
      INCLUDE 'parameters.input'
      DIMENSION STATEV (NSTATV) , COORDS (NCRDS)

cc-- size of array block
      call bloarrsiz (NGMV , NVM1 , NVM2 , NVM3 , NOV)

cc-- initial data
      call inidata (vfGri , vfFi , vfPi , vfCmi , TempTP , denGri ,
.      denMxRef , denT)

cc-- constant incubation model (ausferritic transformation)
      call sgmaxbha (Si , Mn , Cr , Ni , Cu , Mo , ako , ak1 , ak2)

cc-- general variables
      icheck=0
      icheck=icheck+1      ! vfGr
      STATEV (icheck)=vfGri
      icheck=icheck+1      ! vfFs
      STATEV (icheck)=vfFi
      icheck=icheck+1      ! vfAs
      STATEV (icheck)=0.D0
      icheck=icheck+1      ! vfP
      STATEV (icheck)=vfPi
      icheck=icheck+1      ! vfCm

```

### C.3. Subrutinas desarrolladas

```

STATEV(icheck)=vfCmi
icheck=icheck+1      ! vfFm
STATEV(icheck)=vfPi-vfCmi
icheck=icheck+1      ! vfAm
STATEV(icheck)=0.D0
icheck=icheck+1      ! vfAf
STATEV(icheck)=0.D0
icheck=icheck+1      ! vfAh
STATEV(icheck)=0.D0
icheck=icheck+1      ! vfA
STATEV(icheck)=0.D0
icheck=icheck+1      ! free
STATEV(icheck)=0.D0
icheck=icheck+1      ! vfFp
STATEV(icheck)=0.D0
icheck=icheck+1      ! vfAb
STATEV(icheck)=0.D0
icheck=icheck+1      ! cAav
STATEV(icheck)=0.D0
icheck=icheck+1      ! cAR
STATEV(icheck)=1.4D0
icheck=icheck+1      ! vfAusf
STATEV(icheck)=0.D0
icheck=icheck+1      ! vfM
STATEV(icheck)=0.D0
icheck=icheck+1      ! vfMfb
STATEV(icheck)=0.D0
icheck=icheck+1      ! vfMh
STATEV(icheck)=0.D0
icheck=icheck+1      ! cGammablockav
STATEV(icheck)=0.D0

pi=4.D0*datan(1.D0)
NSETGR=1              ! (one graphite set)
do ISETGR=1,NSETGR
  grnden1=denvngr      ! from parameters.input
  grnden=1.D9*grnden1
  vfGrset=vfGri        ! from parameters.input
  vfGrsi=vfGrset
  RGri=(3.D0*vfGrsi/(4.D0*pi*grnden))**(1.D0/3.D0)
  icheck=icheck+1      ! RGr
  STATEV(icheck)=RGri
  icheck=icheck+1      ! RA
  STATEV(icheck)=0.D0
  icheck=icheck+1      ! RAusf
  STATEV(icheck)=0.D0
  icheck=icheck+1      ! cAsetav
  STATEV(icheck)=0.D0
  icheck=icheck+1      ! RF (eutectoid transformation)
  STATEV(icheck)=0.D0
enddo

NSETP=1              ! (one pearlite set)
do ISETP=1,NSETP
  icheck=icheck+1      ! XCm
  sip=eip              ! from parameters.input
  IF (vfPi.EQ.0.D0) THEN
    XCmi=0.D0
  ELSE
    RCmP=vfCmi/vfPi
    XCmi=(sip/2.D0)*RCmP
  ENDIF
  STATEV(icheck)=XCmi

```

## Apéndice C. Implementación del modelo del TTA en Abaqus

```

        icheck=icheck+1          ! IA
        STATEV(icheck)=0.DO
    enddo

    NRGMV=icheck
    if (NRGMV.gt.NGMV) then
        LOP=-3
        call STDB_ABQERR(LOP,'SDVINI USER SUBROUTINE: NUMBERS OF ' //
        . 'GENERAL VARIABLES (%I) BIGGER THAN NGMV',NRGMV,REALV,
        . CHARV)
    endif

cc-- eutectoide inverse variables
    icheck=NGMV
    icheck=icheck+1            ! vfGri
    STATEV(icheck)=vfGri
    icheck=icheck+1            ! vfFi
    STATEV(icheck)=vfFi
    icheck=icheck+1            ! vfPi
    STATEV(icheck)=vfPi

    NRVM1=icheck-NGMV
    if (NRVM1.gt.NVM1) then
        LOP=-3                ! stop
        call STDB_ABQERR(LOP,'SDVINI USER SUBROUTINE: NUMBERS OF ' //
        . 'MODEL 1 VARIABLES (%I) BIGGER THAN NVM1',NRVM1,REALV,
        . CHARV)
    endif

cc-- ausferritic variables
    icheck=NGMV+NVN1
    icheck=icheck+1            ! xio
    STATEV(icheck)=0.DO
    icheck=icheck+1            ! deltao
    STATEV(icheck)=0.DO

    nsetgr=1
    do isetgr=1,nsetgr
        icheck=icheck+1        ! cGammablocki
        STATEV(icheck)=0.DO
        icheck=icheck+1        ! xi
        STATEV(icheck)=0.DO
        icheck=icheck+1        ! vfFpi
        STATEV(icheck)=0.DO
        icheck=icheck+1        ! vfAfi
        STATEV(icheck)=0.DO
        icheck=icheck+1        ! vfAbi
        STATEV(icheck)=0.DO
        icheck=icheck+1        ! vfFpgbi
        STATEV(icheck)=0.DO
        icheck=icheck+1        ! vfFpauti
        STATEV(icheck)=0.DO
    enddo

    icheck=icheck+1            ! ako
    STATEV(icheck)=ako
    icheck=icheck+1            ! ak1
    STATEV(icheck)=ak1
    icheck=icheck+1            ! ak2
    STATEV(icheck)=ak2

    NRVM2=icheck-(NGMV+NVN1)
    if (NRVM2.gt.NVM2) then
        LOP=-3

```

### C.3. Subrutinas desarrolladas

```

        call STDB_ABQERR(LOP,'SDVINI USER SUBROUTINE: NUMBERS OF ' //
        . 'MODEL 2 VARIABLES (%I) BIGGER THAN NVM2',NRVM2,REALV,
        . CHARV)
        endif

cc-- martensitic variables
        icheck=NGMV+NVM1+NVM2
        icheck=icheck+1          ! free
        STATEV(icheck)=0.DO
        icheck=icheck+1          ! free
        STATEV(icheck)=0.DO

        NRVM3=icheck-(NGMV+NVM1+NVM2)
        if (NRVM3.gt.NVM3) then
            LOP=-3
            call STDB_ABQERR(LOP,'SDVINI USER SUBROUTINE: NUMBERS OF ' //
            . 'MODEL 3 VARIABLES (%I) BIGGER THAN NVM3',NRVM3,REALV,
            . CHARV)
            endif

cc-- other variables
        icheck=NGMV+NVM1+NVM2+NVM3
        icheck=icheck+1          ! temp at the beginnig of step
        STATEV(icheck)=Tamb
        icheck=icheck+1          ! total density
        STATEV(icheck)=denT
        icheck=icheck+1          ! rtemp
        STATEV(icheck)=0.DO
        icheck=icheck+1          ! dfvAs
        STATEV(icheck)=0.DO
        icheck=icheck+1          ! dfvAm
        STATEV(icheck)=0.DO
        icheck=icheck+1          ! heat flux
        STATEV(icheck)=0.DO
        icheck=icheck+1          ! denMx
        STATEV(icheck)=denMxRef
        icheck=icheck+1          ! denMxRef
        STATEV(icheck)=denMxRef
        icheck=icheck+1          ! dfvFp
        STATEV(icheck)=0.DO

        NROV=icheck-(NGMV+NVM1+NVM2+NVM3)
        if (NROV.gt.NOV) then
            LOP=-3
            call STDB_ABQERR(LOP,'SDVINI USER SUBROUTINE: NUMBERS OF ' //
            . 'OTHER VARIABLES (%I) BIGGER THAN NOV',NROV,REALV,
            . CHARV)
            endif

cc-- check DEPVAR
        NSTATVU=NGMV+NVM1+NVM2+NVM3+NOV
        if (NSTATVU.gt.NSTATV) then
            LOP=-3
            call STDB_ABQERR(LOP,'SDVINI USER SUBROUTINE: NUMBERS OF ' //
            . 'REQUITED STATEV VARIABLES (%I) BIGGER THAN DEPVAR',
            . NSTATVU,REALV,CHARV)
            endif

        RETURN
        END

CCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCC
C
C   Phase change

```

## Apéndice C. Implementación del modelo del TTA en Abaqus

```

C
CCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCC
C
C
C
CCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCC
C   author: A.D. Boccardo
C   date: 06-2016
CCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCC

SUBROUTINE USDFLD(FIELD, STATEV, PNEWDT, DIRECT, T, CELENT, TIME, DTIME,
1   CMNAME, ORNAME, NFIELD, NSTATV, NOEL, NPT, LAYER, KSPT, KSTEP, KING,
2   NDI, NSHR, COORD, JMAC, JMTYP, MATLAYO, LACCFLG)
IMPLICIT INTEGER(i, j, k, l, m, n)
INCLUDE 'ABA_PARAM.INC'
INCLUDE 'parameters.input'
CHARACTER*80 CMNAME, ORNAME
CHARACTER*3 FLGRAY(15)
DIMENSION FIELD(NFIELD), STATEV(NSTATV), DIRECT(3, 3), T(3, 3), TIME(2),
*   COORD(*), JMAC(*), JMTYP(*)
DIMENSION ARRAY(15), JARRAY(15)

cc-- block array size
call bloarrsiz(NGMV, NVM1, NVM2, NVM3, NOV)

cc-- variables
c- general variables
  icheck=0
  icheck=icheck+1
  fvGr=STATEV(icheck)
  icheck=icheck+1
  fvF=STATEV(icheck)
  icheck=icheck+1
  icheck=icheck+1
  fvP=STATEV(icheck)
  icheck=icheck+5
  icheck=icheck+1
  fvA=STATEV(icheck)
  icheck=icheck+1
  icheck=icheck+1
  fvPB=STATEV(icheck)
  icheck=icheck+1
  icheck=icheck+1
  cA=STATEV(icheck)
  icheck=icheck+2
  icheck=icheck+1
  fvM=STATEV(icheck)

c- other variables
  icheck=NGMV+NVM1+NVM2+NVM3
  icheck=icheck+1
  altemp=STATEV(icheck)

cc-- temperature at first of increment
CALL GETVRM('TEMP', ARRAY, JARRAY, FLGRAY, JRCD,
.   JMAC, JMTYP, MATLAYO, LACCFLG)
temp=ARRAY(1)

cc-- temperatura rate
rtemp=(temp - altemp)/DTIME

cc-- density
call density(temp, cA, denA, denF, denCm,
.   denP, denGr, 0.00, denM)

```

### C.3. Subrutinas desarrolladas

```

denT=fvGr*denGr+(fvF+fvFB+fvM)*denF+fvP*denP+fvA*denA
cc-- phases change
    call solsol1(temp,STATEV,TIME,DTIME,NSTATV,rtemp)
    call solsol2(temp,STATEV,TIME,DTIME,NSTATV)
    call solsol3(temp,STATEV,TIME,DTIME,NSTATV)

cc-- transfer microscopical to statev variable
    icheck=NGMV+NVM1+NVM2+NVM3
    icheck=icheck+1
    STATEV(icheck)=temp

    icheck=icheck+1
    STATEV(icheck)=denT

    icheck=icheck+1
    STATEV(icheck)=rtemp

    RETURN
    END

CCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCC
C
C   Heat flux by phase change
C
CCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCC
C
C
C
CCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCC
C   author: A.D. Boccardo
C   date: 06-2016
CCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCC

    SUBROUTINE HETVAL(CMNAME,TEMP,TIME,DTIME,STATEV,FLUX,
1 PREDEF,DPRED)
    IMPLICIT INTEGER(i,j,k,l,m,n)
    INCLUDE 'ABA_PARAM.INC'
    INCLUDE 'parameters.input'
    CHARACTER*80 CMNAME
    DIMENSION TEMP(2),STATEV(*),PREDEF(*),TIME(2),FLUX(2),
1 DPRED(*)

cc-- block array size
    call bloarrsiz(NGMV,NVM1,NVM2,NVM3,NOV)

cc-- variable initialization
c- general variables
    icheck=0
    icheck=icheck+1
    fvGr=STATEV(icheck)
    icheck=icheck+1
    fvF=STATEV(icheck)
    icheck=icheck+1
    icheck=icheck+1
    fvP=STATEV(icheck)
    icheck=icheck+5
    icheck=icheck+1
    fvA=STATEV(icheck)
    icheck=icheck+3
    icheck=icheck+1
    cA=STATEV(icheck)

c- other variables

```

## Apéndice C. Implementación del modelo del TTA en Abaqus

```

        icheck=NGMV+NVM1+NVM2+NVM3
        icheck=icheck+3
        icheck=icheck+1
        dfvAs=STATEV(icheck)
        icheck=icheck+1
        dfvAm=STATEV(icheck)
        icheck=icheck+3
        icheck=icheck+1
        dfvFp=STATEV(icheck)
cc-- total density
    call density(TEMP(1),cA,denA,denF,denCm,
        .
        denP,denGr,0.DO,denM)
        denT=fvGr*denGr+fvF*denF+fvP*denP+fvA*denA
cc-- heatflux
    heatfluxf=-hlf*dfvAs*denT/DTIME
    heatfluxp=-hlp*dfvAm*denT/DTIME
    heatfluxfp=hlp*dfvFp*denT/DTIME
    heatflux=heatfluxf+heatfluxp+heatfluxfp
    FLUX(1)=heatflux
cc-- save variables
    icheck=NGMV+NVM1+NVM2+NVM3
    icheck=icheck+5
    icheck=icheck+1
    STATEV(icheck)=heatflux

    RETURN
    END

CCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCC
C
C      Thermal strain
C
CCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCC
C
C
C
CCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCC
C      author: A.D. Boccardo
C      date: 06-2016
CCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCC

    SUBROUTINE UEXPAN(EXPAN,DEXPANDT,TEMP,TIME,DTIME,PREDEF,
1      DPRED,STATEV,CMNAME,NSTATV,NOEL)
    IMPLICIT INTEGER(i,j,k,l,m,n)
    INCLUDE 'ABA_PARAM.INC'
    INCLUDE 'parameters.input'
    CHARACTER*80 CMNAME
    DIMENSION EXPAN(*),DEXPANDT(*),TEMP(2),TIME(2),PREDEF(*),
1      DPRED(*),STATEV(NSTATV)
cc-- block array size
    call bloarrsiz(NGMV,NVM1,NVM2,NVM3,NOV)
cc-- variables
c- general variables
    icheck=0
    icheck=icheck+1
    vfGr=STATEV(icheck)
    icheck=icheck+1
    vfFs=STATEV(icheck)
    icheck=icheck+1

```

### C.3. Subrutinas desarrolladas

```

    icode=icode+1
    vfP=STATEV(icode)
    icode=icode+1
    vfCm=STATEV(icode)
    icode=icode+1
    icode=icode+1
    vfAm=STATEV(icode)
    icode=icode+1
    vfAf=STATEV(icode)
    icode=icode+1
    vfAh=STATEV(icode)
    icode=icode+1
    vfA=STATEV(icode)
    icode=icode+1
    icode=icode+1
    vfFp=STATEV(icode)
    icode=icode+1
    vfAb=STATEV(icode)
    icode=icode+1
    cAav=STATEV(icode)
    icode=icode+1
    cAR=STATEV(icode)
    icode=icode+1
    icode=icode+1
    vfM=STATEV(icode)
    icode=icode+1
    vfMb=STATEV(icode)
    icode=icode+1
    vfMh=STATEV(icode)
    icode=icode+1

c-  other variables
    cGammablockav=STATEV(icode)
    icode=NGMV+NVM1+NVM2+NVM3
    icode=icode+6
    icode=icode+1
    aldenMx=STATEV(icode)
    icode=icode+1
    denMxRef=STATEV(icode)

cc-- mechanical model
    if (vfFp.gt.0.D0) then
        call density(TEMP(1),cAR,denAf,denF,denCm,denP,denGr,0.D0,denM)
        call density(TEMP(1),cAav,denAh,denF,denCm,denP,denGr,cAav,
        .   denMh)
        .
        call density(TEMP(1),cGammablockav,denAb,denF,denCm,denP,denGr,
        .   cGammablockav,denMb)
        denMx=vfGr*denGr+(vfFs+vfFp)*denF+vfP*denP+vfAf*denAf+
        .   vfAh*denAh+vfAb*denAb+vfMb*denMb+vfMh*denMh
        .
    else
        call density(TEMP(1),cAav,denA,denF,denCm,denP,denGr,cAav,denM)
        denMx=vfGr*denGr+vfFs*denF+vfP*denP+vfA*denA+vfM*denM
    endif

    epc=(denMxRef/3.D0)*(aldenMx-denMx)/(aldenMx*denMx)

    EXPAN(1)=epc

cc-- save variables
    icode=NGMV+NVM1+NVM2+NVM3
    icode=icode+6
    icode=icode+1
    STATEV(icode)=denMx

```

## Apéndice C. Implementación del modelo del TTA en Abaqus

```

RETURN
END

CCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCC
C
C   STATEV size
C
CCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCC
C
C
C
CCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCC
C   author: A.D. Boccardo
C   date: 06-2016
CCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCC

SUBROUTINE BLOARRSIZ(NGMV,NVM1,NVM2,NVM3,NOV)
IMPLICIT INTEGER(i,j,k,l,m,n)
INCLUDE 'ABA_PARAM.INC'

cc-- STATEV shape
c |-----| |-----| |-----| |-----| |-----|
c   NGMV      NVM1      NVM2      NVM3      NOV
cc-- block size
   NGMV=30          !maximum number of general variables
   NVM1=10          !maximum number of model 1 variables
   NVM2=12          !maximum number of model 2 variables
   NVM3=10          !maximum number of model 3 variables
   NOV=10          !maximum number of other variables

RETURN
END

CCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCC
C
C   Initial data
C
CCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCC
C
C
C
CCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCC
C   author: A.D. Boccardo
C   date: 06-2016
CCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCC

SUBROUTINE INIDATA(vfGri,vfFi,vfPi,vfCmi,TempTP,denGri,
.   denMxRef,denT)
IMPLICIT INTEGER(i,j,k,l,m,n)
INCLUDE 'ABA_PARAM.INC'
INCLUDE 'parameters.input'

cc-- parameters
   cFCm=0.03D0
   cGr=100.D0
   ccCm=6.67D0

cc-- volume fraction

```

### C.3. Subrutinas desarrolladas

```

vfini=vfFini+vfPini
if (vfini.ne.1.D0) then
  LOP=-3
  call STDB_ABQERR(LOP,'SDVINI USER SUBROUTINE: INITIAL ' //
    'VOLUME FRACTION OF MATRIX (%R) NOT EQUAL TO ONE',INTV,
    vfini,CHARV)
endif

cc-- density
call density(Tamb,0.D0,denAi,denFi,denCmi,denPi,denGri,
  0.D0,denM)

cc-- carbon concentration
TempPo=727.D0+30.07D0*Si-1.98D0*Si**2.D0-10.7D0*Cu-13.7D0*Mn
  +9.3D0*Mo+24.3D0*Cr-12.D0*Ni
TempP=727.D0+21.6D0*Si+0.023D0*Si**2.D0+8.D0*Mo+13.D0*Cr-21.D0*Cu
  -25.D0*Mn-33.D0*Ni
if (TempPo.gt.TempP) then

  TempTP=TempPo
else
  TempTP=TempP
endif

CP=(0.1876D0-4.112D-4*TempTP+2.26D-7*TempTP**2.D0+
  0.125D0*Si/100.D0)*100.D0

cc-- volume fraction

ccmdenmo=cFCm*denFi*vfFini+CP*denPi*vfPini
vfGri=0.1D0
do i=1,1000,1
  denTo=vfGri*denGri+(1.D0-vfGri)*(denFi*vfFini+denPi*vfPini)
  vfGri=(C*denTo-ccmdenmo)/(cGr*denGri-ccmdenmo)

enddo
vfFi=(1.D0-vfGri)*vfFini
vfPi=(1.D0-vfGri)*vfPini
vfCmi=vfPi*(CP-cFCm)/(ccCm-cFCm) !using lever rule

cc-- density of matriz denMRef
denMxRef=vfGri*denGri+vfFi*denFi+vfPi*denPi
denT=vfGri*denGri+vfFi*denFi+vfPi*denPi

RETURN
END

```

```

CCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCC
C
C   Maximum free energy available for nucleation
C
CCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCC
C
C
C
C
C
CCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCC
C   author: A.D. Boccardo

```

## Apéndice C. Implementación del modelo del TTA en Abaqus

```

C      date: 06-2016
CCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCC
.
SUBROUTINE SGMAXBHA(csi,cmn,ccr,cni,ccu,cmo,ao,a1,a2)
DOUBLE PRECISION C(12),CW(12),TGMAX(20,2),res(400,3)
DOUBLE PRECISION A(3,3),an(3,1),B(3,1)
DOUBLE PRECISION CCmax,CCmin,dCC,CC,ao,a1,a2,GMAXF,err,
.   err1,Gn,aktempmin,aktempmax,csi,cmn,ccr,cni,ccu,cmo
INTEGER ntemp,nmax,k,kk,j,nhcomp,index,nres,LOP
PARAMETER (nmax=20)

cc--  chemical composition

CCmax=1.3D0           ! C max
CCmin=0.5D0           ! C min
C(2)=csi              ! Si
C(3)=cmn              ! Mn

C(4)=cni              ! Ni
C(5)=cmo              ! Mo
C(6)=ccr              ! Cr
C(7)=0.D0             ! V
C(8)=0.D0             ! Co

C(9)=ccu              ! Cu
C(10)=0.D0            ! Al
C(11)=0.D0            ! W

cc--  temperate range [K]

aktempmin=473.D0
aktempmax=873.D0

cc--  variables

ntemp=20               ! number of temperetures (min 2)
nhcomp=20              ! number of chemical composition (min 2)
if ((ntemp.gt.nmax).or.(nhcomp.gt.nmax)) then
  LOP=-3
  call STDB_ABQERR(LOP,'SGMAXBHA: WRONG NTEMP OR' //
.   'NHCMP > NMAX',ntemp,REALV,CHARV)
endif

cc--  solve gmax
dCC=(CCmax-CCmin)/(nhcomp-1)

index=0
do kk=1,nhcomp,1
  C(1)=CCmin+(kk-1.D0)*dCC
  CW(1)=C(1)

  CW(2)=C(2)
  CW(3)=C(3)
  CW(4)=C(4)
  CW(5)=C(5)
  CW(6)=C(6)

  CW(7)=C(7)
  CW(8)=C(8)
  CW(9)=C(9)
  CW(10)=C(10)
  CW(11)=C(11)

```

### C.3. Subrutinas desarrolladas

```

        call MAP_STEEL_MUCG73(aktempmin,aktempmax,
        .           ntemp,CW,TGMAX)

c   note about MAP_STEEL_MUCG73:
c   Copyright Dr. H. K. D. H. Bhadeshia, University of Cambridge
c   Department of Materials Science and Metallurgy, Pembroke
c   St. Cambridge CB2 3QZ

        do k=1,ntemp,1

                CC=C(1)
                index=index+1
                res(index,1)=CC
                res(index,2)=TGMAX(k,1)
                res(index,3)=TGMAX(k,2)

        enddo
enddo

cc-- fit curve (multi linear regresion)

c   GMAXF=ao+a1*CC+a2*CTEMP
c   [A]*[an]=[B] ==>
c   --
c   | ntemp*nchcomp sum(CC)          sum(CTEMP) | |ao| |sum(GMAX) |
c   | sum(CC)        sum(CC**2)      sum(CC*CTEMP) |*|a1|=|sum(CC*GMAX) |
c   | sum(CTEMP)     sum(CC*CTEMP)  sum(CTEMP**2) | |a2| |sum(CTEMP*GMAX)|
c   --
c   --

nres=ntemp*nchcomp
A(1,1)=nres

A(1,2)=0.D0
A(1,3)=0.D0
A(2,1)=0.D0
A(2,2)=0.D0
A(2,3)=0.D0
A(3,1)=0.D0
A(3,2)=0.D0
A(3,3)=0.D0
B(1,1)=0.D0
B(2,1)=0.D0
B(3,1)=0.D0
do j=1,nres,1
        A(1,2)=A(1,2)+res(j,1)
        A(1,3)=A(1,3)+res(j,2)
        A(2,1)=A(2,1)+res(j,1)
        A(2,2)=A(2,2)+res(j,1)**2.D0
        A(2,3)=A(2,3)+res(j,1)*res(j,2)
        A(3,1)=A(3,1)+res(j,2)
        A(3,2)=A(3,2)+res(j,1)*res(j,2)
        A(3,3)=A(3,3)+res(j,2)**2
        B(1,1)=B(1,1)+res(j,3)
        B(2,1)=B(2,1)+res(j,1)*res(j,3)
        B(3,1)=B(3,1)+res(j,2)*res(j,3)
enddo

c- solve the system using gaus method
    call sgauss(A,an,B)

c   note about sgauss:
c   Gaussian elimination with scaled row pivoting
c   Numerical Analysis: Mathematics of Scientific Computing
c   Third Edition, D.R. Kincaid & E.W. Cheney, Brooks/Cole Publ., 2002

```

## Apéndice C. Implementación del modelo del TTA en Abaqus

```

c      Copyright (c) 1996

      ao=an(1,1)
      a1=an(2,1)
      a2=an(3,1)

      RETURN
      END

CCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCC
C
C      Phase density
C
CCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCC
C
C
C
CCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCC
C      author: A.D. Boccardo
C      date: 06-2016
CCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCC

      SUBROUTINE DENSITY(Temp,cA,denA,denF,denCm,denP,denGr,cM,denM)
      IMPLICIT INTEGER(i,j,k,l,m,n)
      INCLUDE 'ABA_PARAM.INC'
      INCLUDE 'parameters.input'

cc-- parameters
cF=0.03D0
cFCm=0.03D0
cCm=6.67D0
Tref=20.D0
denGret=2200.D0      !graphite density at enviroment temperature

cc-- austenite density
denA=8099.79D0-0.506D0*Temp+(-118.26D0+0.00739D0*Temp)*cA
.      +(-7.59D0+(3.422D-3)*Temp-(5.388D-7)*Temp**2.D0
.      -0.014271D0*Cr)*Cr+(1.54D0+(2.267D-3)*Temp
.      -(11.26D-7)*Temp**2.D0+0.062642D0*Ni)*Ni
.      -68.24D0*Si-6.01D0*Mn+12.45D0*Mo

cc-- ferrite density
denF=7875.96D0-0.297D0*Temp-(5.62D-5)*Temp**2.D0
.      +(-206.35D0+0.00778D0*Temp+(1.472D-6)*Temp**2)*cF
.      +(-8.58D0+(1.229D-3)*Temp+(0.852D-7)*Temp**2.D0
.      +0.018367D0*Cr)*Cr+(-0.22D0-(0.47D-3)*Temp
.      -(1.855D-7)*Temp**2.D0+0.104608D0*Ni)*Ni
.      -36.86D0*Si-7.24D0*Mn+30.78D0*Mo

cc-- cementite density
denCm=7686.45D0-0.0663D0*Temp-(3.12D-4)*Temp**2.D0

cc-- pearlite density
TempPo=727.D0+30.07D0*Si-1.98D0*Si**2.D0-10.7D0*Cu-13.7D0*Mn
.      +9.3D0*Mo+24.3D0*Cr-12.D0*Ni
CP=(0.1876D0-4.112D-4*TempPo+2.26D-7*TempPo**2.D0+
.      0.125D0*Si/100.D0)*100.D0
fvCmP=(CP-cFCm)/(cCm-cFCm)
denP=(1.D0-fvCmP)*denF+fvCmP*denCm

cc-- graphite density
alphagr=(4.06D-6)*(0.853157D0+(4.26564D-4)*Temp-
.      (1.42849D-7)*Temp**2.D0)
denGr=denGret/(3.D0*alphagr*(Temp-Tref)+1.D0)

```

### C.3. Subrutinas desarrolladas

```

cc--  . martensite density
c-    . parameters
      . rc=0.071D0                !nm
      . BAlp=18.D-6              ![1/K]
      . TAlpdeb=305.D0          ![K]
      . Ak=103.9D-4             !for boccardo's modification
      . AloGamAlp=1.D0-Ak       !loGam/loAlp

c-    .
      . Tempkel=Temp+273.D0      ![K]
      . Trefk=Tref+273.D0
      . if (Tempkel.eq.Trefk) then
          . alphafpht=BAlp*AloGamAlp*(1.D0-dexp(-Tempkel/TAlpdeb))
          . alphafpht=alphafpht
        . else
          . alphafpht=BAlp*AloGamAlp*(1.D0+TAlpdeb/(Tempkel-Trefk)*
            . (dexp(-Tempkel/TAlpdeb)-dexp(-Trefk/TAlpdeb)))
          . endif
          . alphaM=alphafpht

c-    . martensite density at ambient temperature and without carbon content
c      . (equal than ferrite density)
      . cM1=0.D0
      . denM1=7875.96D0-0.297D0*Tref-(5.62D-5)*Tref**2.D0
      .   +(-206.35D0+0.00778D0*Tref+(1.472D-6)*Tref**2)*cM1
      .   +(-8.58D0+(1.229D-3)*Tref+(0.852D-7)*Tref**2.D0
      .   +0.018367D0*Cr)*Cr+(-0.22D0-(0.47D-3)*Tref
      .   -(1.855D-7)*Tref**2.D0+0.104608D0*Ni)*Ni
      .   -36.86D0*Si-7.24D0*Mn+30.78D0*Mo

      . alMo=((2.D0*55.845D0/(denM1*(1000.D0*6.02214129D23)/
        . (1000.D0*100.D0**3.D0)))*(1.D0/3.D0))/1.D-8)/100.D0

      . rfe=alMo*(3.D0**(1.D0/2.D0))/4.D0

c-    . lattice parameter
      . wc=cM
      . wfe=100.D0-(Mn+Cr+Ni+Cu+Ti+Mo+Sn+V+Al+Si+wc)
      . cxM=(wc/12.011D0)/(wc/12.011D0+wfe/55.845D0)
      . fexM=(wfe/55.845D0)/(wc/12.011D0+wfe/55.845D0)
      . xc=100.D0*wc*55.845D0/(wfe*12.0107D0)

      . alM=(4.D0*rfe/(3.D0**(1.D0/2.D0))-
        . xc*((4.D0*rfe/(3.D0**(1.D0/2.D0))-
          . (2.D0)**(1.D0/2.D0)*(rfe+rc))/(4.D0*10.D0)))*
        . (1.D0+alphaM*(Temp-Tref)*fexM+alphagr*(Temp-Tref)*cxM)
      . c1M=(4.D0*rfe/(3.D0**(1.D0/2.D0))+xc*((2.D0*(rfe+rc)-
        . 4.D0*rfe/(3.D0**(1.D0/2.D0)))/(4.D0*10.D0)))*
        . (1.D0+alphaM*(Temp-Tref)*fexM+alphagr*(Temp-Tref)*cxM)

c-    . density
      . wmtM=2.D0*55.845D0
      . denM=(wmtM/(1000.D0*c1M*1.D-8*(alM*1.D-8)**2.D0)/
        . 6.02214129D23)/1000.D0*100.D0**3.D0

      . RETURN
      . END

```

```

CCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCC
C
C   Reverse eutectoide transformation
C
CCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCC

```

## Apéndice C. Implementación del modelo del TTA en Abaqus

```

C
C
C
CCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCC
C   author: A.D. Boccardo
C   date: 06-2016
CCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCC

SUBROUTINE SOLSOL1(Temp,STATEV,TIME,DTIME,NSTATV,rtemp)
IMPLICIT INTEGER(i,j,k,l,m,n)
INCLUDE 'ABA_PARAM.INC'
INCLUDE 'parameters.input'
DIMENSION STATEV(NSTATV),TIME(2)
DIMENSION ASETGR(10,15)  !array of graphite set (variables,nsetgr)
DIMENSION ASETP(10,15)  !array of pearlite colony set (variables,nsetp)

cc-- block array size
call bloarrsiz(NGMV,NVM1,NVM2,NVM3,NOV)

cc-- load variables
  icheck=0
  icheck=icheck+1
  vfGr=STATEV(icheck)
  icheck=icheck+1
  vfFs=STATEV(icheck)
  icheck=icheck+1
  vfAs=STATEV(icheck)
  icheck=icheck+1
  vfP=STATEV(icheck)
  icheck=icheck+1
  vfCm=STATEV(icheck)
  icheck=icheck+1
  vfFm=STATEV(icheck)
  icheck=icheck+1
  vfAm=STATEV(icheck)
  icheck=icheck+1
  icheck=icheck+1
  vfAh=STATEV(icheck)
  icheck=icheck+1
  vfA=STATEV(icheck)
  icheck=icheck+3
  icheck=icheck+1
  cAav=STATEV(icheck)
  icheck=icheck+5
  icheck=icheck+1
  cGammablockav=STATEV(icheck)

  nsetgr=1
  do isetgr=1,nsetgr
    icheck=icheck+1
    RGr=STATEV(icheck)
    ASETGR(2,isetgr)=RGr
    icheck=icheck+1
    RA=STATEV(icheck)
    ASETGR(6,isetgr)=RA
    icheck=icheck+1
    icheck=icheck+1
    cAsetav=STATEV(icheck)
    ASETGR(8,isetgr)=cAsetav
    icheck=icheck+1
  enddo

  nsetp=1
  do isetp=1,nsetp

```

### C.3. Subrutinas desarrolladas

```

        icheck=icheck+1
        XCm=STATEV(icheck)
        ASETP(5,isetp)=XCm
        icheck=icheck+1
        XA=STATEV(icheck)
        ASETP(4,isetp)=XA
    enddo

    icheck=NGMV
    icheck=icheck+1
    vfGri=STATEV(icheck)
    icheck=icheck+1
    vfFi=STATEV(icheck)
    icheck=icheck+1
    vfPi=STATEV(icheck)

cc-- some parameters from parameters.input
    cc=C
    csi=Si
    cmn=Mn
    ccr=Cr
    cni=Ni
    ccu=Cu
    cmo=Mo

    nsetgr=1
    do isetgr=1,nsetgr
        grnden1=denvngr
        ASETGR(1,isetgr)=1.D9*grnden1

        vfGrset=vfGri
        ASETGR(7,isetgr)=vfGrset
    enddo

    NSETP=1
    do ISETP=1,NSETP
        vfcelP=vfPi
        ASETP(1,ISETP)=vfcelP

        sip=eip
        ASETP(6,isetp)=sip
    enddo

cc-- parameters
    ipc=0                !0: don't transf. 1: ferrite.
                        !2: pearlite. 3: austenite.

    vfAslast=vfAs
    vfAmlast=vfAm
    dfvAs=0.D0
    dfvAm=0.D0

cc-- temperatures
    TempFo=739.D0+31.5D0*csi-7.7D0*ccu-18.7D0*cmn+3.3D0*cmo-
    . 10.7D0*ccr-26.D0*cni
    TempF=739.D0+18.4D0*csi+2.D0*csi**2.D0-14.D0*ccu-
    . 45.D0*cmn+2.D0*cmo-24.D0*ccr-27.5D0*cni
    TempP=727.D0+21.6D0*csi+0.023D0*csi**2.D0+8.D0*cmo+13.D0*ccr-
    . 21.D0*ccu-25.D0*cmn-33.D0*cni
    TempPo=727.D0+30.07D0*csi-1.98D0*csi**2.D0-10.7D0*ccu-13.7D0*cmn+
    . 9.3D0*cmo+24.3D0*ccr-12.D0*cni

cc-- carbon concentration
    CP=(0.1876D0-4.112D-4*TempPo+2.26D-7*TempPo**2.D0+
    . 0.125D0*csi/100.D0)*100.D0

```

## Apéndice C. Implementación del modelo del TTA en Abaqus

```

cFGr=0.03D0
cFCm=0.03D0
cGr=100.D0
cCm=6.67D0
cFA=(6.7D-4-5.D-10*Temp**2.D0-2.8D-7*Temp+
. (1.2D-8*Temp**2.D0-4.5D-3)*csi/100.D0)*100.D0
cAF=(0.1876D0-4.112D-4*Temp+2.26D-7*Temp**2.D0+
. 0.125D0*csi/100.D0)*100.D0
cAGr=(Temp-1154.6D0-6.5D0*csi)*(1.5D0-0.216D0*csi)/
. (354.6D0+6.5D0*csi)+2.1D0-0.216D0*csi
cAGr1=0.335D-3*Temp+1.61D-6*Temp**2.D0+0.006D0*cmn
. -0.11D0*csi-0.07D0*cnl+0.014D0*ccu-0.3D0*cmo-0.435D0
cACm=(Temp-491.27D0)/365.95D0

cc-- density
if (cAav.eq.0.D0) then
  cAav=CP
endif
call density(Temp,cAav,denA,denF,denCm,denP,denGr,0.D0,denM)
denT=vfGr*denGr+vfFs*denF+vfP*denP+vfA*denA

cc-- radii
pi=4.D0*datan(1.D0)
do isetgr=1,nsetgr
  grnden=ASETGR(1,isetgr)
  vfGrset=ASETGR(7,isetgr)
  vfFset=vfGrset*vfFi/vfGri
  vfAset=vfGrset*(1.D0-vfGri)/vfGri
  RF=(3.D0*vfGrset*(1.D0+vfFset/vfGrset)/
. (4.D0*pi*grnden))**(1.D0/3.D0)
  ASETGR(4,isetgr)=RF

  Rcel=(3.D0*vfGrset*(1.D0+vfAset/vfGrset)/
. (4.D0*pi*grnden))**(1.D0/3.D0)
  ASETGR(3,isetgr)=Rcel

  RGr=ASETGR(2,isetgr)
  RAi=1.01D0*RGr
  ASETGR(5,isetgr)=RAi
enddo

cc-- length
do isetp=1,nsetp
  sip=ASETP(6,isetp)
  XF=sip/2.D0
  ASETP(2,isetp)=XF

  XCm=ASETP(5,isetp)
  XAi=1.01D0*XCm
  ASETP(3,isetp)=XAi
enddo

cc-- coefficient of carbon diffusion in austenite and ferrite
DfA=1.67D-6*dexp(-1.2D5/(8.314472*(Temp+273.D0)))
Tc=1043.D0-1000.D0*csi/100.D0
DfF=7.9D-7*dexp(-7.58D4/(8.314472*(Temp+273.D0)))

cccccccccccccccccccccccccccccccccccccccc
cc-- phase change ferrite
cccccccccccccccccccccccccccccccccccccccc
if ((Temp.gt.TempFo).and.(vfFs.gt.0.D0)) then
  ipc=1
  sumGr=0.D0
  sumF=0.D0

```

### C.3. Subrutinas desarrolladas

```

sumAs=0.DO
do isetgr=1,nsetgr
  grnden=ASETGR(1,isetgr)
  RGr=ASETGR(2,isetgr)
  RF=ASETGR(4,isetgr)
  RAi=ASETGR(5,isetgr)
  RA=ASETGR(6,isetgr)
c- RA for frist input
  if (RA.le.RGr) RA=RAi
c- cbm(cFo)
  vfGraux=(RGr/RF)**3.DO
  vfFsaux=1.DO-(RA/RF)**3.DO
  vfAsaux=(RA**3.DO-RGr**3.DO)/RF**3.DO

  denT1=denGr*vfGraux+denF*vfFsaux+denA*vfAsaux
  denT=vfGr*denGr+vfFs*denF+vfP*denP+vfA*denA
  CT1=(cc*denT-CP*denP*vfPi)/(denT1*(1.DO-vfPi))
  cbm=2.DO*(CT1*denT1-cGr*denGr*vfGraux-
  .      (cAGr+cAF)/2.DO*vfAsaux*denA-
  .      cFA/2.DO*denF*vfFsaux)/
  .      (denF*vfFsaux)
  if (cbm.lt.0.01DO) cbm=0.01DO
  if (cbm.gt.0.06DO) cbm=0.06DO
c- delta radius of graphite
  delRGr=DfA*denA*RA*(cAF-cAGr)/(RGr*(RA-RGr)*
  .      (cGr*denGr-cAGr*denA))*DTIME
  if (delRGr.gt.0.DO) delRGr=0.DO
c- delta radius of austenite
  delRA=(DfF*denF*RF*(cbm-cFA)/(RA*(RF-RA))-DfA*denA*
  .      RGr*(cAF-cAGr)/(RA*(RA-RGr)))/
  .      (cAF*denA-cFA*denF)*DTIME
  if (delRA.lt.0.DO) delRA=0.DO ! I use it for stabilize the solve
c- impediment effect
  fraceq=vfGraux+vfAsaux
  if ((fraceq.ge.0.5DO).and.(RA.ne.RF)) then
    delRA=delRA*((1.DO-fraceq)/(1.DO-0.5DO))**(2.DO/3.DO)
  endif
c- radius of graphite at time t+delt
  RGr=RGr+delRGr
c- radius of austenite at time t+delt
  RA=RA+delRA
  if (RA.gt.RF) RA=RF
c- for help solve
  if ((RF-RA)/RF.le.0.001DO) then
    RA=RF
  endif
c- sum of graphite, austenite and ferrite
  sumGr=grnden*RGr**3.DO+sumGr
  sumAs=grnden*(RA**3.DO-RGr**3.DO)+sumAs
  sumF=grnden*(RF**3.DO-RA**3.DO)+sumF
  ASETGR(2,isetgr)=RGr
  ASETGR(6,isetgr)=RA
enddo
c- volumetrix fraction of graphite, austenite and ferrite at time t+delt

```

## Apéndice C. Implementación del modelo del TTA en Abaqus

```

        vfGr=4.D0/3.D0*pi*sumGr
        vfAs=4.D0/3.D0*pi*sumAs
        vfFs=4.D0/3.D0*pi*sumF
        dfvAs=(vfAs-vfAslast)/(1.D0-vfGr)
    endif

cccccccccccccccccccccccccccccccccccccccccc
cc-- phase change pearlite
cccccccccccccccccccccccccccccccccccccccccc
    if ((Temp.gt.TempPo).and.(vfP.gt.0.D0)) then
        ipc=2
        sumP=0.D0
        sumCm=0.D0
        sumAm=0.D0

        do isetp=1,nsetp
            vfcelP=ASETP(1,isetp)
            XF=ASETP(2,isetp)
            XAi=ASETP(3,isetp)
            XA=ASETP(4,isetp)
            XCm=ASETP(5,isetp)

c-   XA for first input
            if (XA.lt.XAi) XA=XAi

c-   cbm(cFo)
            vfAmaux=(XA-XCm)/XF
            vfCmaux=XCm/XF
            vfFmaux=(XF-XA)/XF

            cbm=2.D0*(CP*denP-cCm*denCm*vfCmaux-
            .   (cACm+cAF)/2.D0*denA*vfAmaux-
            .   cFA/2.D0*denF*vfFmaux)/
            .   (denF*vfFmaux)
            if (cbm.lt.0.01D0) cbm=0.01D0
            if (cbm.gt.0.06D0) cbm=0.06D0

c-   delta cementite
            delXCm=DfA*denA*(cAF-cACm)*DTIME/((XA-XCm)*
            .   (cCm*denCm-cACm*denA))
            if (delXCm.gt.0.D0) delXCm=0.D0 !for help to solve

c-   delta austenite
            delXA=-DfA*denA*(cAF-cACm)*DTIME/((XA-XCm)*
            .   (cAF*denA-cFA*denF))+DfF*denF*(cbm-cFA)/
            .   ((XF-XA)*(cAF*denA-cFA*denF))*DTIME
            if (delXA.lt.0.D0) delXA=0.D0

c-   length cementite at time t+delt
            XCm=XCm+delXCm
            if (XCm.lt.0.D0) XCm=0.D0

c-   length austenite at time t+delt
            XA=XA+delXA
            if (XA.gt.XF) XA=XF

c-   for help solve
            if ((XF-XA)/XF.le.0.001D0) then
                XCm=0.D0
                XA=XF
            endif

c-   sum of pearlite, austenite and cementite
            sumAm=vfcelP*((XA-XCm)/XF)+sumAm

```

### C.3. Subrutinas desarrolladas

```

        sumP=vfcelP*(1.DO-(XA-XCm)/XF)+sumP
        sumCm=vfcelP*(XCm/XF)+sumCm

        ASETP(4,isetp)=XA
        ASETP(5,isetp)=XCm
    enddo

c-   volumetrix fraction of cementite, austenite, ferrite and perlite at
c     time t+delt
        vfAm=sumAm
        vfP=sumP
        vfCm=sumCm
        vfFm=vfP-vfCm
        dfvAm=(vfAm-vfAmlast)/(1.DO-vfGr)
    endif

cccccccccccccccccccccccccccccccccccccccc
cc-- volume fraction of austenite
cccccccccccccccccccccccccccccccccccccccc
        if ((ipc.eq.1).or.(ipc.eq.2)) then
            vfA=vfAs+vfAm
            cAav=(cAGr*vfAs+CP*vfAm)/vfA
        endif

cccccccccccccccccccccccccccccccccccccccc
cc-- austenite homogenization
cccccccccccccccccccccccccccccccccccccccc
        if (TempP.gt.TempFo) then
            TempAH=TempP
        else
            TempAH=TempFo
        endif

        if ((Temp.ge.TempAH).and.(rtemp.ge.0.DO)) then
            if (vfP.eq.0.DO.and.vfFs.eq.0.DO) then
                vfAh=vfA
                sumGr=0.DO
                sumA=0.DO
                RAav=0.DO
                cbmav=0.DO
                RGrav=0.DO

                do isetgr=1,nsetgr
                    grnden=ASETGR(1,isetgr)
                    RGr=ASETGR(2,isetgr)
                    Rcel=ASETGR(3,isetgr)
                    cAsetav=ASETGR(8,isetgr)
                enddo

c-   cbm(cAo)

                    vfGraux=(RGr/Rcel)**3.DO
                    vfAaux=1.DO-(RGr/Rcel)**3.DO
                    denT=vfGr*denGr+vfA*denA

                    cbm=(2.DO*cc*denT-2.DO*vfGraux*cGr*denGr-
                        vfAaux*denA*cAGr1)/(vfAaux*denA)
                    if (cbm.lt.0.3D0) cbm=0.3D0
                    if (cbm.gt.1.5D0) cbm=1.5D0

c-   delta graphite
                    delRGr=DfA*denA*Rcel*(cbm-cAGr1)/(RGr*(Rcel-RGr)*
                        (cGr*denGr-cAGr1*denA))*DTIME

c-   graphite radius at time t+delt

```

## Apéndice C. Implementación del modelo del TTA en Abaqus

```

        RGr=RGr+delRGr
c-   new austenite radius
        RA=Rcel
c-   sum of graphite and austenite
        sumGr=grnden*RGr**3.D0+sumGr
c-   sum of radii
        RGrav=RGr+RGrav
        RAav=RA+RAav
        cbmav=cbm+cbmav
c-   average austenite carbon concentration for each set
        cAsetav=RA*(cAGr1-cbm)/(RA-RGr)*(RGr/(RA-RGr)*
        .       dlog(RA/RGr)-1)+cAGr1
c-
        ASETGR(2,isetgr)=RGr
        ASETGR(6,isetgr)=RA
        ASETGR(8,isetgr)=cAsetav
        enddo
c-   average austenite carbon concentration
        RGrav=RGrav/nsetgr
        RAav=RAav/nsetgr
        cbmav=cbmav/nsetgr
        cAav=RAav*(cAGr1-cbmav)/(RAav-RGrav)*(RGrav/(RAav-RGrav)*
        .       dlog(RAav/RGrav)-1)+cAGr1
        cGammablockav=cAav
c-   volume fraction of graphite, ferrite and austenite at time t+delt
        vfGr=4.D0/3.D0*pi*sumGr
        vfA=1.D0-vfGr
        endif
        endif
cc-- save variables
        icodev=0
        icodev=icodev+1
        STATEV(icodev)=vfGr
        icodev=icodev+1
        STATEV(icodev)=vfFs
        icodev=icodev+1
        STATEV(icodev)=vfAs
        icodev=icodev+1
        STATEV(icodev)=vfP
        icodev=icodev+1
        STATEV(icodev)=vfCm
        icodev=icodev+1
        STATEV(icodev)=vfFm
        icodev=icodev+1
        STATEV(icodev)=vfAm
        icodev=icodev+1
        icodev=icodev+1
        STATEV(icodev)=vfAh
        icodev=icodev+1
        STATEV(icodev)=vfA
        icodev=icodev+3
        icodev=icodev+1
        STATEV(icodev)=cAav
        icodev=icodev+5
        icodev=icodev+1
        STATEV(icodev)=cGammablockav

```

### C.3. Subrutinas desarrolladas

```

do isetgr=1,nsetgr
  icheck=icheck+1
  RGr=ASETGR(2,isetgr)
  STATEV(icheck)=RGr
  icheck=icheck+1
  RA=ASETGR(6,isetgr)
  STATEV(icheck)=RA
  icheck=icheck+1
  icheck=icheck+1
  cAsetav=ASETGR(8,isetgr)
  STATEV(icheck)=cAsetav
  icheck=icheck+1
enddo

do isetp=1,nsetp
  icheck=icheck+1
  XCm=ASETGR(5,isetp)
  STATEV(icheck)=XCm
  icheck=icheck+1
  XA=ASETGR(4,isetp)
  STATEV(icheck)=XA
enddo

icheck=NGMV+NVM1+NVM2+NVM3
icheck=icheck+1
icheck=icheck+1
icheck=icheck+1
icheck=icheck+1
STATEV(icheck)=dfvAs
icheck=icheck+1
STATEV(icheck)=dfvAm

RETURN
END

```

```

CCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCC
C
C   Ausferritic transformation
C
CCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCC
C
C
C
CCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCC
C   author: A.D. Boccardo
C   date: 06-2016
CCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCC

SUBROUTINE SOLSOL2(Temp,STATEV,TIME,DTIME,NSTATV)
IMPLICIT INTEGER(i,j,k,l,m,n)
INCLUDE 'ABA_PARAM.INC'
INCLUDE 'parameters.input'
DIMENSION STATEV(NSTATV),TIME(2)
DIMENSION ASETGR(15,15)

cc-- block array size
call bloarrsiz(NGMV,NVM1,NVM2,NVM3,NOV)

cc-- variable initialization
c- general variables
icheck=0
icheck=icheck+1
vfGr=STATEV(icheck)

```

## Apéndice C. Implementación del modelo del TTA en Abaqus

```

    icheck=icheck+6
    icheck=icheck+1
    vfAf=STATEV(icheck)
    icheck=icheck+1
    vfAh=STATEV(icheck)
    icheck=icheck+1
    vfA=STATEV(icheck)
    icheck=icheck+1
    icheck=icheck+1
    vfFp=STATEV(icheck)
    icheck=icheck+1
    vfAb=STATEV(icheck)
    icheck=icheck+1
    cGamma=STATEV(icheck)
    icheck=icheck+1
    cARav=STATEV(icheck)
    icheck=icheck+1
    vfAusf=STATEV(icheck)
    icheck=icheck+3
    icheck=icheck+1
    cGammablockav=STATEV(icheck)

nsetgr=1
do isetgr=1,nsetgr
    icheck=icheck+1
    RGr=STATEV(icheck)
    ASETGR(2,isetgr)=1.D6*RGr
    icheck=icheck+1
    RA=STATEV(icheck)
    ASETGR(4,isetgr)=1.D6*RA
    icheck=icheck+1
    RAusf=STATEV(icheck)
    ASETGR(3,isetgr)=1.D6*RAusf
    icheck=icheck+1
    cGammai=STATEV(icheck)
    ASETGR(5,isetgr)=cGammai
    icheck=icheck+1
    RF=STATEV(icheck)
    ASETGR(6,isetgr)=1.D6*RF
enddo

c-   ausferritic variables
    icheck=NGMV+NVM1
    icheck=icheck+1
    xio=STATEV(icheck)
    icheck=icheck+1
    deltao=STATEV(icheck)

nsetgr=1
do isetgr=1,nsetgr
    icheck=icheck+1
    cGammablocki=STATEV(icheck)
    if (cGammablocki.eq.0.D0) then
        cGammablocki=ASETGR(5,isetgr)
    endif
    ASETGR(9,isetgr)=cGammablocki
    icheck=icheck+1
    xi=STATEV(icheck)
    ASETGR(10,isetgr)=xi
    icheck=icheck+1
    vfFpi=STATEV(icheck)
    ASETGR(11,isetgr)=vfFpi
    icheck=icheck+1
    vfAfi=STATEV(icheck)

```

### C.3. Subrutinas desarrolladas

```

    ASETGR(12,isetgr)=vfAfi
    icode=icode+1
    vfAfi=STATEV(icode)
    ASETGR(13,isetgr)=vfAfi
    icode=icode+1
    vfFpgbi=STATEV(icode)
    ASETGR(14,isetgr)=vfFpgbi
    icode=icode+1
    vfFpauti=STATEV(icode)
    ASETGR(15,isetgr)=vfFpauti
enddo

    icode=icode+1
    ako=STATEV(icode)
    icode=icode+1
    ak1=STATEV(icode)
    icode=icode+1
    ak2=STATEV(icode)

cc-- parameters from parameters.input
cc=C
csi=Si
cmn=Mn
ccr=Cr
cni=Ni
ccu=Cu
cmo=Mo

nsetgr=1
do isetgr=1,nsetgr
  grnden1=denvngr
  ASETGR(1,isetgr)=grnden1/1.D9 ! nodule/mm3 to nodule/microm3
enddo

cc-- parameters
pi=4.D0*datan(1.D0)
cAlphap=0.03D0

vfFpl=vfFp
dfvFp=0.D0
ipc=0      ! ipc=0 no transformation.
           ! ipc=1 transformation.

ibsm=1
if (ibsm.eq.1) then
  TBS=830.D0-270.D0*cGamma-90.D0*cmn-37.D0*cni-70.D0*ccr
-   -83.D0*cmo
elseif (ibsm.eq.2) then
  TBS1=-1.D0*(2540.D0+ako+ak1*cGamma)/(ak2-3.637D0)
  bko=3.072D0-0.24D0*csi-0.161D0*cmn-0.115D0*cni+0.25D0*ccu+
.   0.06D0*cmo+2.69D0*ccr
  bk1=-0.0016D0
  TBS2=(cGamma-bko)/bk1
  if (TBS1.le.TBS2) then
    TBS=TBS1
  else
    TBS=TBS2
  endif
endif

TMS=772.D0-300.D0*cGamma-33.3D0*cmn-11.1D0*csi-22.2D0*ccr
.   -16.7D0*cni-11.1D0*cmo-273.D0

Tkel=Temp+273.D0

```

## Apéndice C. Implementación del modelo del TTA en Abaqus

```

cGammaTo=3.072D0-0.0016D0*Temp-0.24D0*csi-0.161D0*cmn
.
-0.115D0*cni+0.25D0*ccu+0.06D0*cmo+2.69D0*ccr
Tgeo=Tkel
Tgeomax=450.D0+273.D0
if (Tgeo.gt.Tgeomax) Tgeo=Tgeomax
plength=10.D0*(Tgeo-528.D0)/150.D0
up=20.D0*((Tgeo-528.D0)/150.D0)**3.D0

xfpab=0.12D0

call density(Temp,cGamma,denA,denF,denCm,denP,denGr,0.D0,
.
denM)
call density(Temp,cGammaTo,denATo,denF,denCm,denP,denGr,
.
0.D0,denM)
vfFpmax=(cGammaTo*denATo-cGamma*denA)/
.
(cGammaTo*denATo-cAlphap*denF)

cccccccccccccccccccccccccccccccccccccc
cc--      ausferritic phase change
cccccccccccccccccccccccccccccccccccccc
      if ((Temp.lt.TBS).and.(Temp.gt.TMS).and.(vfA.gt.0.D0)) then
          ipc=1

cc--      maximum free energy available for nucleation (bhadeshia's model)
          delGmo=ako+ak1*cGamma+ak2*Temp

c-      ausferrite growth
          vfAusflast=vfAusf
          vfAusf=0.D0
          vfAh=0.D0
          do isetgr=1,nsetgr
              grnden=ASETGR(1,isetgr)
              RGr=ASETGR(2,isetgr)
              RAusf=ASETGR(3,isetgr)
              RA=ASETGR(4,isetgr)
              cGammai=ASETGR(5,isetgr)
              RF=ASETGR(6,isetgr)
c-      initial ausferrite radius
          if (RF.lt.RGr) then
              RAusfini=RGr
          else
              RAusfini=RF
          endif
          if (RAusf.lt.RAusfini) RAusf=RAusfini
          cGammablocki=ASETGR(9,isetgr)
c-      rAusf growth
          call ausferrite(delGmo,Tkel,cGammablocki,cGammaTo,cGammai,
.
plength,DTIME,RAusf,RA,vfAusflast,vfGr,ck4,ck5)
c-      austenite and austenite halo volume fraction
          vfAusf=vfAusf+4.D0/3.D0*pi*grnden*(RAusf**3.D0-RGr**3.D0)
          vfAh=vfAh+4.D0/3.D0*pi*grnden*(RA**3.D0-RAusf**3.D0)
          ASETGR(3,isetgr)=RAusf
          enddo

c-      ferrite growth
          vfFp=0.D0
          vfAf=0.D0
          vfAb=0.D0
          sumcGammablocki=0.D0
          do isetgr=1,nsetgr
              grnden=ASETGR(1,isetgr)
              RGr=ASETGR(2,isetgr)
              RA=ASETGR(4,isetgr)
              RAusf=ASETGR(3,isetgr)

```

### C.3. Subrutinas desarrolladas

```

cGammmai=ASETGR(5,isetgr)
cGammablocki=ASETGR(9,isetgr)
xi=ASETGR(10,isetgr)
vfFpi=ASETGR(11,isetgr)
vfAfi=ASETGR(12,isetgr)
vfAbi=ASETGR(13,isetgr)
vfFpgbi=ASETGR(14,isetgr)
vfFpauti=ASETGR(15,isetgr)
c-   vfFpi growth
      vol=4.D0/3.D0*pi*RA**3.D0 !rve volume (microm3/nodule)
      Ak=(4.D0*pi/3.D0)*vfFpmax*((RGr+plength)**3.D0-RGr**3.D0)/up
      Bk=1.D0
      vfFpgbmax=vfFpmax*((RGr+plength)/RA)**3.D0-(RGr/RA)**3.D0
      call ferrite(vfFpi,xfpab,cGammmai,cAlphap,cGammaTo,delGmo,
      .           Tk1,xi,Bk,vol,up,DTIME,vfFpauti,Ak,vfFpgbi,vfFpgbmax,
      .           vfFpmax,RGr,RA,RAusf,vfAfi,vfAbi,cGammablocki,ck4,ck5)

c-   vfFp volume fraction
      vfFp=vfFp+4.D0/3.D0*pi*grnden*vfFpi*RA**3.D0
      vfFpaux=vfFpmax*(vfAusf+vfAh)
      if (vfFp.gt.vfFpaux) vfFp=vfFpaux !control
      vfAf=vfAf+4.D0/3.D0*pi*grnden*vfAfi*RA**3.D0
      vfAb=vfAb+4.D0/3.D0*pi*grnden*vfAbi*RA**3.D0
      sumcGammablocki=sumcGammablocki+cGammablocki
      ASETGR(9,isetgr)=cGammablocki
      ASETGR(10,isetgr)=xi
      ASETGR(11,isetgr)=vfFpi
      ASETGR(12,isetgr)=vfAfi
      ASETGR(13,isetgr)=vfAbi
      ASETGR(14,isetgr)=vfFpgbi
      ASETGR(15,isetgr)=vfFpauti
      enddo
      cGammablockav=sumcGammablocki/nsetgr
      vfA=vfAf+vfAb+vfAh
      dfvFp=(vfFp-vfFpl)/(1.D0-vfGr)

c-   xiooverall and deltaoverall
      xio=vfFp/vfFpaux
      deltao=vfAusf/(vfAusf+vfAh)

c-   austenite film carbon concentration
      cARav=cGammaTo
      endif

cc-- save variables
      icode=0
      icode=icode+7
      icode=icode+1
      STATEV(icode)=vfAf
      icode=icode+1
      STATEV(icode)=vfAh
      icode=icode+1
      STATEV(icode)=vfA
      icode=icode+1
      icode=icode+1
      STATEV(icode)=vfFp
      icode=icode+1
      STATEV(icode)=vfAb
      icode=icode+1
      icode=icode+1
      STATEV(icode)=cARav
      icode=icode+1
      STATEV(icode)=vfAusf
      icode=icode+3

```

Apéndice C. Implementación del modelo del TTA en Abaqus

```

  icode=icode+1
  STATEV(icode)=cGammablockav

  do  isetgr=1,nsetgr
    icode=icode+1
    icode=icode+1
    icode=icode+1
    RAusf=ASETGR(3,isetgr)
    STATEV(icode)=1.D-6*RAusf
    icode=icode+1
    icode=icode+1
  enddo

  icode=NGMV+NVM1
  icode=icode+1
  STATEV(icode)=xio
  icode=icode+1
  STATEV(icode)=deltao

  do  isetgr=1,nsetgr
    icode=icode+1
    cGammablocki=ASETGR(9,isetgr)
    STATEV(icode)=cGammablocki
    icode=icode+1
    xi=ASETGR(10,isetgr)
    STATEV(icode)=xi
    icode=icode+1
    vfFpi=ASETGR(11,isetgr)
    STATEV(icode)=vfFpi
    icode=icode+1
    vfAfi=ASETGR(12,isetgr)
    STATEV(icode)=vfAfi
    icode=icode+1
    vfAbi=ASETGR(13,isetgr)
    STATEV(icode)=vfAbi
    icode=icode+1
    vfFpgbi=ASETGR(14,isetgr)
    STATEV(icode)=vfFpgbi
    icode=icode+1
    vfFpauti=ASETGR(15,isetgr)
    STATEV(icode)=vfFpauti
  enddo

  icode=NGMV+NVM1+NVM2+NVM3
  icode=icode+8

  icode=icode+1
  STATEV(icode)=dfvFp

  RETURN
  END

c*****
c  ferrite growth
c*****
  SUBROUTINE FERRITE(vfFpi,xfpab,cGammai,cAlphap,cGammaTo,delGmo,
.      Tkel,xi,Bk,vol,up,DTIME,vfFpauti,Ak,vfFpgbi,vfFpgbmax,
.      vfFpmax,RGr,RA,RAusf,vfAfi,vfAbi,cGammablocki,ck4,ck5)
  IMPLICIT INTEGER (i,j,k,l,m,n)
  INCLUDE 'ABA_PARAM.INC'

cc-- austenite block carbon concentration
  vfAusfi=(RAusf**3.D0-RGr**3.D0)/RA**3.D0 !Rcel ??
  vfFpgo=vfFpi/vfAusfi

```

### C.3. Subrutinas desarrolladas

```

vfAfgo=vfFpgo*xfpab
vfAbgo=1.D0-(vfFpgo+vfAfgo)
Temp=Tkel-273.D0
call density(Temp,cGammai,denA,denF,denCm,denP,denGr,0.D0,
.   denM)
call density(Temp,cGammaTo,denATo,denF,denCm,denP,denGr,
.   0.D0,denM)
call density(Temp,cGammablocki,denAb,denF,denCm,denP,denGr,
.   0.D0,denM)
cGammablocki=(cGammai*denA-(vfFpgo*cAlphap*denF+
.   vfAfgo*cGammaTo*denATo))/(vfAbgo*denAb)
if (cGammablocki.gt.cGammaTo) then
  cGammablocki=cGammaTo
elseif (cGammablocki.lt.cGammai) then
  cGammablocki=cGammai
endif

cc-- incubation time and nucleation rate
nr=2
.   !nucleation region
call incubationtime(delGmo,Tkel,cGammablocki,cGammaTo,cGammai,nr,
.   tnn2,ck4,ck5)
anss=1.D0/tnn2

cc-- ferrite platelet (autocatalitic)
Tnpsaut=(1.D0-xi)*Bk*(vol*vfFpi/up)
delvfFpauti=up*anss*Tnpsaut*DTIME/vol
vfFpauti=vfFpauti+delvfFpauti

cc-- ferrite platelet (graphite-austenite)
Tnpsgb=(1.D0-xi)*Ak*(1.D0-vfFpgbi/vfFpgbmax)
if (Tnpsgb.lt.0.D0) Tnpsgb=0.D0
delvfFpgbi=up*anss*Tnpsgb*DTIME/vol
vfFpgbi=vfFpgbi+delvfFpgbi

cc-- ferrite platelet volume fraction
vfFpi=vfFpgbi+vfFpauti
vfFpadm=vfFpmax*vfAusfi
if (vfFpi.gt.vfFpadm) then
  vfFpi=vfFpadm
endif

cc-- xi. It is put here to avoid some problems when Ak and Bk are higher.
xi=vfFpi/(vfAusfi*vfFpmax)
if (xi.gt.1.D0) then
  xi=1.D0
endif

cc-- film austenite volume fractions
vfAfi=vfFpi*xfpab

cc-- block austenite volume fraction
vfAbi=vfAusfi-vfFpi*(1.D0+xfpab)
RETURN
END

c*****
c   ausferrite growth: Boccardo's model for
c   ausferritic transformation
c*****
SUBROUTINE AUSFERRITE(delGmo,Tkel,cGammablocki,cGammaTo,cGammai,
.   plength,DTIME,RAusf,RA,vfAusflast,vfGr,ck4,ck5)
IMPLICIT INTEGER (i,j,k,l,m,n)
INCLUDE 'ABA_PARAM.INC'

```

## Apéndice C. Implementación del modelo del TTA en Abaqus

```

cc-- incubation time
nr=1                                !nucleation region
call incubationtime(delGmo,Tkel,cGammablocki,cGammaTo,cGammai,nr,
.   tnn1,ck4,ck5)

cc-- sheaf growth
dRAusf=(plength/tnn1)*DTIME
RAusflast=RAusf
RAusf=RAusflast+dRAusf
if (RAusf.gt.RA) then
    RAusf=RA
endif

cc-- impediment effect
vfi=vfGr+vfAusflast
if (vfi.gt.1.D0) then
    vfi=1.D0
endif

if ((vfi.ge.0.5D0).and.(RAusf.ne.RA)) then
    dRAusfic=dRAusf*((1.D0-vfi)/(1.D0-0.5D0))**(2.D0/3.D0)
    RAusf=RAusflast+dRAusfic;
    if (RAusf.gt.rA) then
        RAusf=RA
    endif
endif

RETURN
END

c*****
c    incubation time of a set of ferrite subunits
c*****
SUBROUTINE INCUBATIONTIME(delGmo,Tkel,cGammablocki,cGammaTo,
.   cGammai,nr,tnn,ck4,ck5)
IMPLICIT INTEGER (i,j,k,l,m,n)
INCLUDE 'ABA_PARAM.INC'

cc-- maximum free energy available for para-equilibrium nucleation
Gn=3.637D0*(Tkel-273.15D0)-2540.D0 !J/mol

cc-- function fab
if (nr.eq.1) then
    cGammablockauxi=(cGammablocki+cGammai)/2.D0
    fab=(cGammablockauxi-cGammai)/(cGammaTo-cGammai)
elseif (nr.eq.2) then
    fab=(cGammablocki-cGammai)/(cGammaTo-cGammai)
endif

cc-- real maximum free energy available for para-equilibrium nucleation
delGm=delGmo-fab*(delGmo-Gn) !write as a function of block carbon
!concentration (done)

cc-- constant
akb=1.3806488D-23                    !Boltzmann constant [m2 kg/(s2 K)]
ah=6.62606957D-34                   !planck constant [m2 kg / s]
anu=akb*Tkel/ah
ck3=2540.D0                          !J/mol
R=8.31432D0                          !J/(K mol)

cc-- incubation time. Matsuda and Bhadeshia.
tnn=ck4/anu*dexp(ck5/(R*Tkel)*(1.D0+delGm/ck3))

RETURN

```

### C.3. Subrutinas desarrolladas

```

||      END

|
|CCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCC
|C
|C      Martensite transfortation
|C
|CCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCC
|C
|C
|C
|CCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCC
|C      author: A.D. Boccardo
|C      date: 06-2016
|CCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCC
|
|      SUBROUTINE SOLSOL3(Temp,STATEV,TIME,DTIME,NSTATV)
|      IMPLICIT INTEGER(i,j,k,l,m,n)
|      INCLUDE 'ABA_PARAM.INC'
|      INCLUDE 'parameters.input'
|      DIMENSION STATEV(NSTATV),TIME(2)
|      DIMENSION ASETGR(10,15)
|
|cc-- block array size
|      call bloarrsiz(NGMV,NVM1,NVM2,NVM3,NOV)
|
|cc-- initial variable
|      icheck=0
|      icheck=icheck+1
|      vfGr=STATEV(icheck)
|      icheck=icheck+6
|      icheck=icheck+1
|      vfAf=STATEV(icheck)
|      icheck=icheck+1
|      vfAh=STATEV(icheck)
|      icheck=icheck+1
|      vfA=STATEV(icheck)
|      icheck=icheck+1
|      icheck=icheck+1
|      vfFp=STATEV(icheck)
|      icheck=icheck+1
|      vfAb=STATEV(icheck)
|      icheck=icheck+1
|      cGamma=STATEV(icheck)
|      icheck=icheck+2
|      icheck=icheck+1
|      vfM=STATEV(icheck)
|      icheck=icheck+1
|      vfMb=STATEV(icheck)
|      icheck=icheck+1
|      vfMh=STATEV(icheck)
|      icheck=icheck+1
|      cGammablockav=STATEV(icheck)
|
|cc-- parameter from parameters.input
|      cc=C
|      csi=Si
|      cmn=Mn
|      ccr=Cr
|      cni=Ni
|      ccu=Cu
|      cmo=Mo
|
|cc-- parameters
|      vfMlast=vfM

```

## Apéndice C. Implementación del modelo del TTA en Abaqus

```

ipc=0      !ipc=0 no transformation.
           !ipc=1 transformation.

TMS=772.D0-300.D0*cGamma-33.3D0*cmn-11.1D0*csi-22.2D0*ccr
.          -16.7D0*cni-11.1D0*cmo-273.D0

cccccccccccccccccccccccccccccccccccccccc
cc-- martensitic phase change
cccccccccccccccccccccccccccccccccccccccc
      if ((Temp.le.TMS).and.(vfA.gt.0.D0)) then
        ipc=1

c-    martensite start temperature (halo, and films and blocks)
      TMSH=772.D0-300.D0*cGamma-33.3D0*cmn-11.1D0*csi-22.2D0*ccr
      .          -16.7D0*cni-11.1D0*cmo-273.D0
      TMSb=772.D0-300.D0*cGammablockav-33.3D0*cmn-11.1D0*csi
      .          -22.2D0*ccr-16.7D0*cni-11.1D0*cmo-273.D0

c-    amount of austenite halo that transforms into martensite
      admierr=0.001D0
      itermax=2000
      vfAMh=0.5D0
      if (Temp.le.TMSH) then
        err=1.1D0*admierr
        ii=0
        do while (err.gt.admierr)
          vfAMh1=vfAMh
          vfAMh=1.D0-dexp(-vfAMh*(1.D0+c2*(TMSH-Temp)))
          err=100.D0*abs(vfAMh-vfAMh1)
          ii=1+ii
          if (ii.gt.itermax) goto 20
        enddo
      else
        vfAMh=0.0D0
      endif
20    continue

c-    amount of austenite block that transforms into martensite
      vfAMb=0.5D0
      if (Temp.le.TMSb) then
        err=1.1D0*admierr
        ii=0
        do while (err.gt.admierr)
          vfAMb1=vfAMb
          vfAMb=1.D0-dexp(-vfAMb*(1.D0+c2*(TMSb-Temp)))
          err=100.D0*abs(vfAMb-vfAMb1)
          ii=1+ii
          if (ii.gt.itermax) goto 21
        enddo
      else
        vfAMb=0.0D0
      endif
21    continue

c-    martensite volume fraction in halo and block
      vfAhorl=vfAh+vfMh
      vfAborl=vfAb+vfMb
      vfMh=vfAMh*vfAhorl
      vfMb=vfAMb*vfAborl

c-    marteniste volume fraction (total)
      vfM=vfMb+vfMh

c-    retained austenite volume fraction (block, halo, and total)

```

### C.3. Subrutinas desarrolladas

```
        vfAh=vfAhorl -vfMh
        vfAb=vfAborl -vfMb
        vfA=vfAh+vfAb+vfAf

    endif

cc-- save variables
      icheck=0
      icheck=icheck+1
      STATEV(icheck)=vfGr
      icheck=icheck+6
      icheck=icheck+1
      STATEV(icheck)=vfAf
      icheck=icheck+1
      STATEV(icheck)=vfAh
      icheck=icheck+1
      STATEV(icheck)=vfA
      icheck=icheck+1
      icheck=icheck+1
      STATEV(icheck)=vfFp
      icheck=icheck+1
      STATEV(icheck)=vfAb
      icheck=icheck+1
      STATEV(icheck)=cGamma
      icheck=icheck+2
      icheck=icheck+1
      STATEV(icheck)=vfM
      icheck=icheck+1
      STATEV(icheck)=vfMb
      icheck=icheck+1
      STATEV(icheck)=vfMh
      icheck=icheck+1
      STATEV(icheck)=cGammablockav

RETURN
END
```