

Un modelo para la descripción de las transiciones de fases en una barra de acero

J. M. DÍAZ MORENO, C. GARCÍA VÁZQUEZ, M. T. GONZÁLEZ
MONTESINOS, F. ORTEGÓN GALLEGO¹

¹ *Dpto. de Matemáticas, Universidad de Cádiz, Campus del Río San Pedro, Puerto Real 11510 Cádiz.*
E-mails: josemanuel.diaz@uca.es, concepcion.garcia@uca.es, mariateresa.gonzalez@uca.es,
francisco.ortegon@uca.es.

Palabras clave: Diagramas TTT y CCT, transiciones de fases en el acero, tratamiento térmico, ecuaciones diferenciales ordinarias, métodos de Runge-Kutta

Resumen

El acero es una aleación de hierro y carbono al que se pueden unir una serie de elementos aleantes (Si, Mn, Ni, Cr, Al, ...). La cantidad de cada uno de ellos determina las propiedades del material y, por tanto, sus usos y aplicaciones industriales.

En los aceros hipoeutectoides (con un nivel de C inferior al 0'77%), se aprecia un cambio significativo en su estructura cristalina en un rango de temperaturas entre los 727°C y los 912°C, aproximadamente. A partir de este proceso de *austenización*, tras un enfriamiento "brusco" aparecen nuevas fases: perlita, ferrita, bainita y, fundamentalmente, martensita. Las propiedades físicas asociadas a cada una de ellas resultan cualitativamente diferentes: la martensita presenta un nivel de dureza superior a las demás fases pero tiene el inconveniente de ser frágil; por contra, la perlita es dúctil.

En este trabajo nos centramos en el estudio de un modelo que describe las transiciones de fases en el acero (concretamente, para los aceros 42CrMo4 y SAE 1145). Se trata de un sistema de ecuaciones diferenciales ordinarias en las que la temperatura será considerada inicialmente un dato, de acuerdo a un perfil de temperatura previamente fijado.

1. Las transiciones de fases

En el proceso de fabricación de una cremallera de dirección (para automóviles, por ejemplo) se parte de un cilindro dentado de acero. Para que cumpla las condiciones que su uso le va a exigir, interesa dotar superficialmente la zona dentada de un mayor nivel de dureza, manteniendo la ductilidad en el resto de la pieza. Para ello, se somete la barra a un

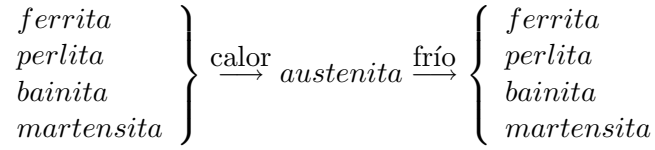


Figura 1: Fases que aparecen en el acero.

proceso de calentamiento por conducción e inducción seguido de un enfriamiento brusco, mediante una *ducha* de agua. El objetivo de este tratamiento térmico es conseguir que aparezca martensita en la parte de los dientes.

La martensita es una fase del acero que corresponde a una estructura cristalina tetragonal lo cual le confiere una mayor dureza que la que presentan otras fases.

A temperatura ambiente, el acero es en general, una mezcla de ferrita, perlita, bainita y martensita. Si se calienta suficientemente, todas estas fases se transforman en austenita. Durante el enfriamiento vuelven a aparecer las fases iniciales (ver figura 1). La distribución de fases final depende de la estrategia de enfriamiento utilizada: la transformación de la austenita en ferrita y perlita corresponde a tasas de enfriamiento relativamente lentas, mientras que los mecanismos de obtención de bainita y, sobre todo, martensita corresponden a transformaciones sin difusión, con el consiguiente aumento en la dureza del material.

Tradicionalmente se manejan esquemas, determinados de modo experimental para cada acero, que describen todas estas transformaciones tanto en transformaciones isoterma como no isoterma (diagramas de fases TTT). En la figura 2 se puede ver, por ejemplo, el diagrama correspondiente al acero SAE 1145 tal y como aparece en [1]. Para una correcta interpretación de la cinética de estas transformaciones, se puede consultar, por ejemplo, la referencia [5]

La idea a partir de este punto es derivar modelos matemáticos que nos permitan describir estos cambios de fases. La identificación de los parámetros que se requieran debe ser efectuada a partir de los diagramas de fases referidos. Asimismo estos esquemas nos proporcionan los datos experimentales necesarios para estimar la precisión del modelo.

2. Un modelo de Leblond-Devauux

En [2], [3], [6] o [7], aparecen modelos matemáticos para las transiciones de fases en el acero. En este trabajo vamos a centrarnos en el que aparece en [6].

Si pensamos inicialmente en la transformación de una fase A en una fase B ($A \rightarrow B$) y denotamos por $0 \leq z(t) \leq 1$ la cantidad de B que existe en el instante t , Leblond y Devauux proponen que la evolución de la cantidad de B se puede regular con una ecuación del tipo

$$\frac{dz}{dt} = \frac{1}{\tau_z(T)} (z_{eq}(T) - z(t))_+,$$

sujeta a un dato inicial $z(0) = z_0$. Aparecen, por tanto, dos funciones que han de ser determinadas a partir de los datos experimentales, ambas dependientes de la temperatura T : $z_{eq}(T)$ y $\tau_z(T)$. La primera de ellas es una función monótona que toma valores comprendidos entre 0 y 1. La segunda de ellas representa un tiempo característico. T es, por

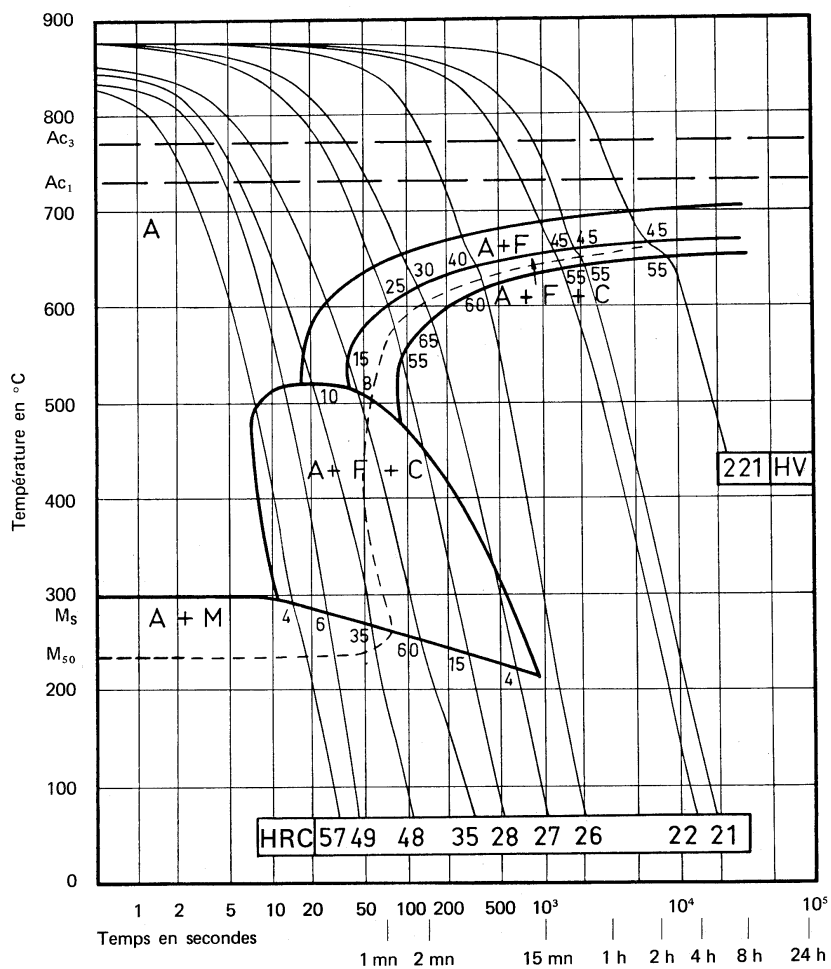
45 M 5

45 M 5

C %	Mo %	Si %	S %	P %	Ni %	Cr %	Cu %
0,47	1,37	0,36	0,025	0,015	0,02	0,15	0,19

Austénitisé à 875 °C 30 mn

Grosueur du grain : 11-12



IRSID - 185, rue Président Roosevelt - 78104 ST GERMAIN EN LAYE - Tél. : 963 24 01

Figura 2: Diagrama CCT para el acero SAE 1145 (cortesía de Sidenor).

tanto, una función dependiente del tiempo (y en su caso de la posición x), que entra como dato en esta ecuación. Además $u_+ = \max\{u, 0\}$ denota la parte positiva de la función u .

Con una buena elección de los parámetros, estas ecuaciones ofrecen un ajuste adecuado de los datos experimentales, incluso si consideramos transformaciones simultáneas entre las diversas fases.

Sean pues $a(t)$, $[f + p]$, $b(t)$ y $m(t)$ las proporciones de austenita, ferrita + perlita, bainita y martensita presentes, respectivamente, en el instante t ($a(t) + [f + p] + b(t) + m(t) = 1$). El sistema de ecuaciones diferenciales ordinarias que consideraremos aquí se escribe

$$\frac{da}{dt} = \frac{1}{\tau_a(T)}(a_{eq}(T) - a(t))_+ - [f + p] - \dot{b} - \dot{m} \quad (1)$$

$$\frac{d[f + p]}{dt} = \frac{1}{\tau_{f+p}(T)}([f + p]_{eq}(T) - [f + p](t))_+ \quad (2)$$

$$\frac{db}{dt} = \frac{1}{\tau_b(T, \dot{T})}(b_{eq}(T) - b(t))_+ \quad (3)$$

$$\frac{dm}{dt} = \frac{1}{\tau_m(T)}(m_{eq}(T) - m(t))_+ \quad (4)$$

- Las fracciones de equilibrio a_{eq} , $[f + p]_{eq}$ y $b_{eq}(t)$ se calculan del diagrama TTT correspondiente, teniendo en cuenta que el valor de equilibrio alcanzado no puede superar en ningún caso la proporción de austenita que no ha sido aún transformada.
- $m_{eq}(t)$ se ajusta utilizando la fórmula de Koistinen-Marburger (véase [4]), i.e.,

$$m_{eq}(T) = 1 - e^{c_{km}(M_s - T)},$$

con c_m y M_s recogidos en el diagrama isoterma de transformación de fases.

- El resto de los parámetros se determinan de un modo “efectivo” a partir de los datos experimentales, resolviendo el sistema reiteradamente hasta conseguir un ajuste adecuado. La función $\tau_b(T)$ ha de ser sustituida para recoger de modo explícito la fuerte dependencia de \dot{T} en el proceso de formación de la bainita.

3. Tratamiento numérico de la transformación de fases en los aceros 42CrMo4 y SAE 1145

Tras la identificación de parámetros analizada en la sección anterior, se utilizan diferentes funciones dato $T(t)$ para resolver las ecuaciones (1) – (4) y comprobar el ajuste entre los datos del modelo teórico y los experimentales, que ofrecen los diagramas CCT.

En la resolución numérica se ha utilizado el programa de computación científica Mathematica, que implementa un esquema adaptativo de cuarto orden (basado en en métodos de Runge-Kutta) para la resolución de los sistemas de ecuaciones diferenciales ordinarias.

Como avance, en la figura 3 se recogen los resultados correspondientes a las transformaciones de fases para el acero 42CrMo83, cuya composición química aparece en la tabla 1, partiendo de un acero austenizado completamente y para distintas tasas de enfriamiento constantes. Se observa como las tasas de enfriamiento más altas corresponden a un aumento en las proporciones finales de martensita obtenidas.

Transiciones de fases en el acero

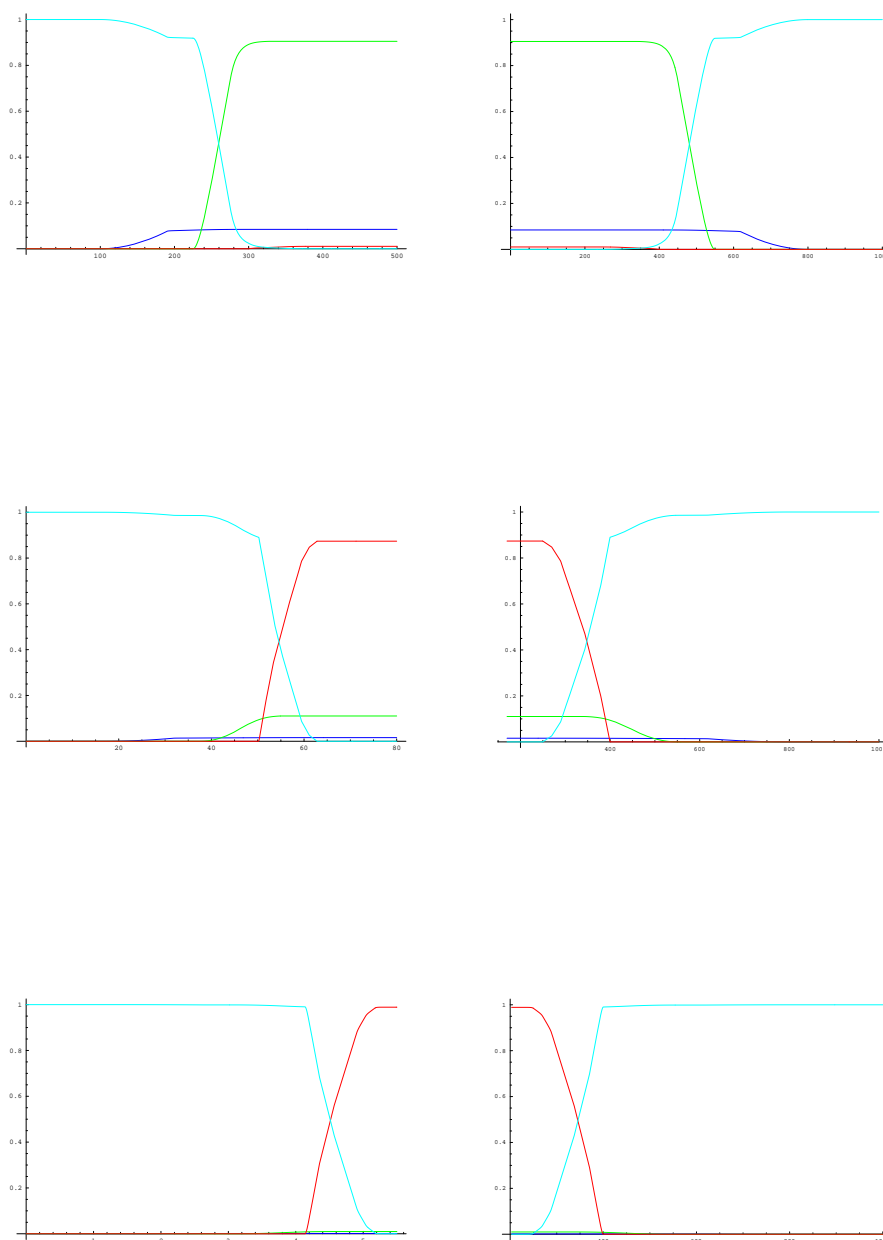


Figura 3: Gráficas de la evolución de la proporción de cada una de las fases con respecto a las variables tiempo y temperatura (columna de la izquierda y derecha, respectivamente) para tasas de enfriamiento constantes de -7200°C/h , -43000°C/h y $-522000^{\circ}\text{C/h}$.

C	Si	Mn	P	S	Cr	Cu	Mo	Ni
0.38	0.23	0.64	0.019	0.013	0.99	0.17	0.16	0.08

Tabla 1: Composición química del acero 42CrMo83.

Agradecimientos

Este trabajo ha sido financiado través del proyecto MTM2006-04436, FEDER, y por la Junta de Andalucía, grupo FQM-315.

Referencias

- [1] American Society for Metals, *Atlas of isothermal and cooling transformations diagrams*, Ohio 1977.
- [2] D. Hömberg, *A mathematical simulation of the Jominy end-quench test*, Acta Mater., 44 (1996), 4375–4385.
- [3] D. Hömberg, W. Weiss, *PID-control of laser surface hardening of steel*, IEEE Transactions on Control Systems Technology, 14 (1995), 896–904.
- [4] D. P. Koistinen, R. E. Marburger, A general equation prescribing the extent of the austenite-martensite transformation in pure iron-carbon alloys and plain carbon steels, Acta Met., 7 (1959), 59–60.
- [5] G. Krauss, *Steels: heat treatment and processing principles*, ASM International 1990.
- [6] J. B. Leblond, J. Devaux, *A new kinetic model for anisothermal metallurgical transformations in steels including effects of austenite grain size*, Acta Metal., 32 (1984), 137–146.
- [7] A. Visitin, Mathematical models of solid-solid phase transitions in steels, IMA J. Appl. Math., 39 (1987), 143–157.