

**UNIVERSIDAD AUTÓNOMA DE NUEVO LEÓN  
FACULTAD DE INGENIERÍA MECÁNICA Y ELÉCTRICA  
DIVISIÓN DE ESTUDIOS DE POSTGRADO**



**SIMULACIÓN DE LA EVOLUCIÓN MICROESTRUCTURAL  
DE ACEROS AL SILICIO DURANTE SU DEFORMACIÓN EN  
CALIENTE**

**TESIS**

**QUE PARA OBTENER EL GRADO DE DOCTOR EN INGENIERÍA  
DE MATERIALES**

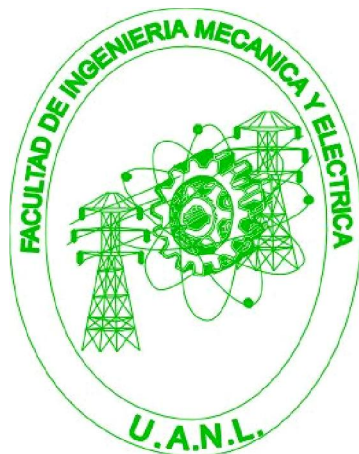
**PRESENTA**

**OSCAR JESÚS ZAPATA HERNÁNDEZ**

**CIUDAD UNIVERSITARIA**

**AGOSTO DEL 2012**

**UNIVERSIDAD AUTÓNOMA DE NUEVO LEÓN  
FACULTAD DE INGENIERÍA MECÁNICA Y ELÉCTRICA  
DIVISIÓN DE ESTUDIOS DE POSTGRADO**



**SIMULACIÓN DE LA EVOLUCIÓN MICROESTRUCTURAL  
DE ACEROS AL SILICIO DURANTE SU DEFORMACIÓN EN  
CALIENTE**

**TESIS**

**QUE PARA OBTENER EL GRADO DE DOCTOR EN INGENIERÍA  
DE MATERIALES**

**PRESENTA**

**OSCAR JESÚS ZAPATA HERNÁNDEZ**

**CIUDAD UNIVERSITARIA**

**AGOSTO DEL 2012**

UNIVERSIDAD AUTÓNOMA DE NUEVO LEÓN  
FACULTAD DE INGENIERÍA MECÁNICA Y ELÉCTRICA  
DIVISIÓN DE ESTUDIOS DE POSTGRADO

Los miembros del comité de tesis recomendamos que la tesis “Simulación de la evolución microestructural de aceros al silicio durante su deformación en caliente”, realizada por el alumno Oscar Jesús Zapata Hernández, matrícula 0962990, sea aceptada para su defensa como opción al grado de Doctor en Ingeniería de Materiales.

El Comité de Tesis

---

Asesor

Dra. Martha Patricia Guerrero Mata.

---

Coasesor

Dr. Luis Adolfo Leduc Lezama

---

Coasesor

Dra. Tania Paloma Berber Solano

---

Coasesor

Dr. Eduardo Valdés Covarrubias

---

Coasesor

Dr. Victor Vázquez Lasso

---

Vo.Bo.

Dr. Moisés Hinojosa Rivera  
División de Estudios de Post-grado.

San Nicolás de los Garza, N.L. Agosto 2012

# DEDICATORIA

A Dios  
por permitirme vivir este momento

A mis padres y hermanos,  
por todo el apoyo brindado

A mis asesores de tesis  
por su incondicional apoyo

# AGRADECIMIENTOS

Agradezco a la Universidad Autónoma de Nuevo León por el apoyo brindado en mis estudios de postgrado a si mismo agradezco a la Facultad de Ingeniería Mecánica y Eléctrica.

Se agradece los apoyos económicos brindados por el CONACYT para realizar el presente trabajo.

A la Dra. Martha Patricia Guerrero por el entusiasmo, paciencia y apoyo recibido durante la realización de este trabajo.

Al Dr. Luis Leduc, por sus valiosos comentarios y sugerencias, ya que éstos fueron parte fundamental de este trabajo de investigación.

A los Doctores Victor Vázquez y Eduardo Valdés por la revisión y sus valiosos comentarios sobre este trabajo.

A la Dra. Tania Berber por su paciencia, entusiasmo y alegría que me motivaron a terminar mi trabajo de tesis.

Al Dr. Rafael Colás Ortiz, por sus valiosos comentarios y por la atención prestada a este trabajo.

A la Dra. Adriana Salas por sus enriquecedores comentarios y apoyo durante la realización de este trabajo.

Doy un agradecimiento especial a todos mis compañeros de generación por la gran amistad que me han brindado y por el apoyo que me dieron durante este estudio de postgrado.

# Contenido

<b>CAPÍTULO 1 INTRODUCCIÓN</b> .....	1
<b>CAPÍTULO 2 ACEROS AL SILICIO</b> .....	4
2.1.    Introducción .....	4
2.2.    Magnetismo .....	9
2.3.    Historia del desarrollo de los aceros eléctricos.....	12
2.4.    Propiedades magnéticas y aplicaciones de los aceros eléctricos .....	13
<b>CAPÍTULO 3 TEXTURA</b> .....	22
3.1.    Introducción .....	22
3.2.    Medición de la textura .....	23
<b>CAPÍTULO 4 TRANSFORMACIONES DE FASE</b> .....	30
4.1.    Mecanismos de transformación de fases .....	30
4.2.    Características de las transformaciones difusionales .....	37
4.3.    Características de las transformaciones sin difusión.....	39
4.4.    Transformaciones de fase en aceros eléctricos.....	40
<b>CAPÍTULO 5 EVOLUCIÓN MICROESTRUCTURAL</b> .....	42
5.1.    Introducción .....	42
5.2.    Deformación plástica .....	43
5.3.    Recuperación .....	44
5.4.    Recristalización .....	47
5.4.1.    Recristalización estática (SRX) .....	51
5.4.2.    Recristalización dinámica (DRX) .....	55
5.5.    Crecimiento normal y anormal de grano.....	56
5.6.    Recristalización en aceros eléctricos.....	62
<b>CAPÍTULO 6 MODELACIÓN MATEMÁTICA Y NUMÉRICA</b> .....	65
6.1.    Introducción .....	65
6.2.    Análisis térmico.....	68
6.3.    Análisis de deformación plástica .....	69
6.4.    Método de elemento finito (MEF) .....	70
6.4.1.    Método de aproximación directa.....	71

6.4.2.	Método de Ritz.....	72
6.4.3.	Método de residuos ponderados.....	74
6.5.	Análisis numérico mediante MEF .....	75
6.5.1.	Análisis térmico mediante el método de residuos ponderados .....	75
6.5.2.	Análisis de deformación plástica mediante el método variacional .....	80
6.6.	Modelos geométricos de microestructura .....	83
6.6.1.	Autómatas celulares (AC) .....	83
6.6.2.	Método de Monte Carlo (MC).....	90
6.6.3.	Campo de fase.....	94
<b>CAPÍTULO 7 EXPERIMENTACIÓN NUMÉRICA .....</b>		<b>98</b>
7.1.	Introducción .....	98
7.2.	Compresión en frío .....	99
7.2.1.	Propiedades mecánicas para el modelo de compresión en frío.....	100
7.2.2.	Evolución microestructural mediante el modelo JMAK.....	101
7.2.3.	Evolución microestructural mediante autómatas celulares .....	102
7.3.	Laminado en caliente .....	103
7.3.1.	Propiedades mecánicas y térmicas para los modelos de laminación en caliente	104
7.3.2.	Modelo termomecánico.....	108
7.3.2.1.	Acero eléctrico con 2 fases (material A2) .....	108
7.3.2.2.	Acero eléctrico ferrítico (material A3).....	110
7.3.3.	Modelo microestructural mediante el modelo JMAK.....	110
7.3.3.1.	Acero eléctrico con 2 fases (material A2) .....	110
7.3.3.2.	Acero eléctrico ferrítico (material A3).....	113
7.3.4.	Modelo microestructural mediante autómatas celulares .....	117
7.3.4.1.	Acero eléctrico con 2 fases (material A2) .....	117
7.3.4.2.	Acero eléctrico ferrítico (material A3).....	118
<b>CAPÍTULO 8 RESULTADOS .....</b>		<b>120</b>
8.1.	Introducción .....	120
8.2.	Resultados de la compresión en frío para el material A1.....	121
8.2.1.	Deformación y temperatura .....	121
8.2.2.	Evolución microestructural mediante el modelo JMAK .....	126
8.2.3.	Evolución microestructural mediante autómatas celulares.....	130
8.3.	Resultados de la laminación en caliente.....	133

8.3.1 Deformación y temperatura.....	133
8.3.1.1. Acero eléctrico con 2 fases (material A2) .....	133
8.3.1.2. Acero eléctrico ferrítico (material A3) .....	137
8.3.4 Evolución microestructural mediante el modelo JMAK.....	140
8.3.4.1. Acero eléctrico con 2 fases (material A2) .....	140
8.3.4.2. Acero eléctrico ferrítico (material A3) .....	141
8.3.5 Evolución microestructural mediante autómatas celulares .....	143
8.3.5.1. Acero eléctrico con 2 fases (material A2) .....	143
8.3.5.2. Acero eléctrico ferrítico (material A3) .....	144
8.4. Predicción de propiedades magnéticas.....	145
<b>CAPÍTULO 9 DISCUSIÓN .....</b>	<b>148</b>
9.1. Introducción .....	148
9.2. Modelos de compresión en frío .....	149
9.3. Modelos de laminación en caliente.....	152
9.4. Propiedades magnéticas .....	155
<b>CAPÍTULO 10 CONCLUSIONES Y RECOMENDACIONES.....</b>	<b>160</b>
10.1 Introducción .....	160
10.2 Modelos de compresión en frío .....	161
10.3 Modelos de laminación en caliente.....	161
10.4 Recomendaciones .....	162
10.5 Aportación científica y tecnológica .....	162
<b>LISTADO DE IMÁGENES .....</b>	<b>164</b>
<b>LISTADO DE SÍMBOLOS .....</b>	<b>168</b>
<b>GLOSARIO.....</b>	<b>171</b>
<b>REFERENCIAS.....</b>	<b>173</b>
<b>RESUMEN AUTOBIOGRÁFICO.....</b>	<b>181</b>



# CAPÍTULO 1

## INTRODUCCIÓN

Los aceros al silicio (también llamados aceros eléctricos) son los materiales ferromagnéticos de mayor producción hoy en día. Éstos forman los núcleos de un gran rango de máquinas eléctricas.

Recientemente se han requerido aceros eléctricos con propiedades magnéticas mejoradas tales como una alta permeabilidad, bajas pérdidas eléctricas y una baja magnetostricción. Esto se debe a que una alta permeabilidad es útil para reducir el tamaño y peso de los transformadores, bajas pérdidas ayudan al ahorro de energía y una baja magnetostricción ayuda a reducir el ruido de los transformadores.

Los factores que afectan las propiedades magnéticas tales como resistividad, tamaño de grano y textura pueden ser controlados a través de una elección apropiada de composición química y condiciones de procesamiento. Esto resultará en una microestructura que estará relacionada directamente con las propiedades magnéticas del producto final.

La microestructura es un término general que se refiere a una distribución espacial de características estructurales las cuales pueden ser fases de diferentes composiciones y/o estructuras cristalinas, granos de diferentes orientaciones, dominios de diferentes variantes estructurales, o dominios con diferentes polarizaciones magnéticas y eléctricas así como defectos estructurales como las dislocaciones. Dicha microestructura controla esencialmente las propiedades finales de una aleación (por ejemplo: dureza, resistencia, ductilidad, tenacidad, permeabilidad magnética, etc.).

El presente proyecto se enfoca en estudiar aceros eléctricos y su modificación mediante tratamientos térmicos, mecanismos de transformación de fase y de recristalización con ayuda de información obtenida de pruebas experimentales y de revisión bibliográfica.

El objetivo del presente trabajo es aplicar los conocimientos de los mecanismos de transformación de fase y de recristalización durante los tratamientos termomecánicos para simular la microestructura de aceros eléctricos y relacionarlos con las propiedades magnéticas. Un modelo matemático que incluya el análisis de esta combinación de mecanismos hace que las ecuaciones constitutivas correspondientes sean extremadamente difíciles de resolver mediante métodos analíticos; por lo tanto, se recurrirá a técnicas numéricas.

En este trabajo se utilizó el paquete comercial DEFORM, el cual utiliza el método de elemento finito y la técnica de autómatas celulares con el cual se desarrollaron modelos termomecánicos y de microestructura.

Una aportación importante de este trabajo es disponer de modelos computacionales que permitan estudiar la influencia de los parámetros metalúrgicos en el procesamiento de los aceros eléctricos.

Los resultados de este trabajo de investigación permitirán generar conocimiento a mayor detalle sobre los mecanismos de recristalización y crecimiento de grano en los aceros eléctricos y su relación con las propiedades magnéticas.

# CAPÍTULO 2

## ACEROS AL SILICIO

### 2.1. Introducción

En el presente capítulo se estudian los parámetros que afectan el desarrollo y desempeño de los aceros eléctricos dejando claro la importancia y la gran incertidumbre que aún existe en el estudio de propiedades magnéticas de este tipo de aceros.

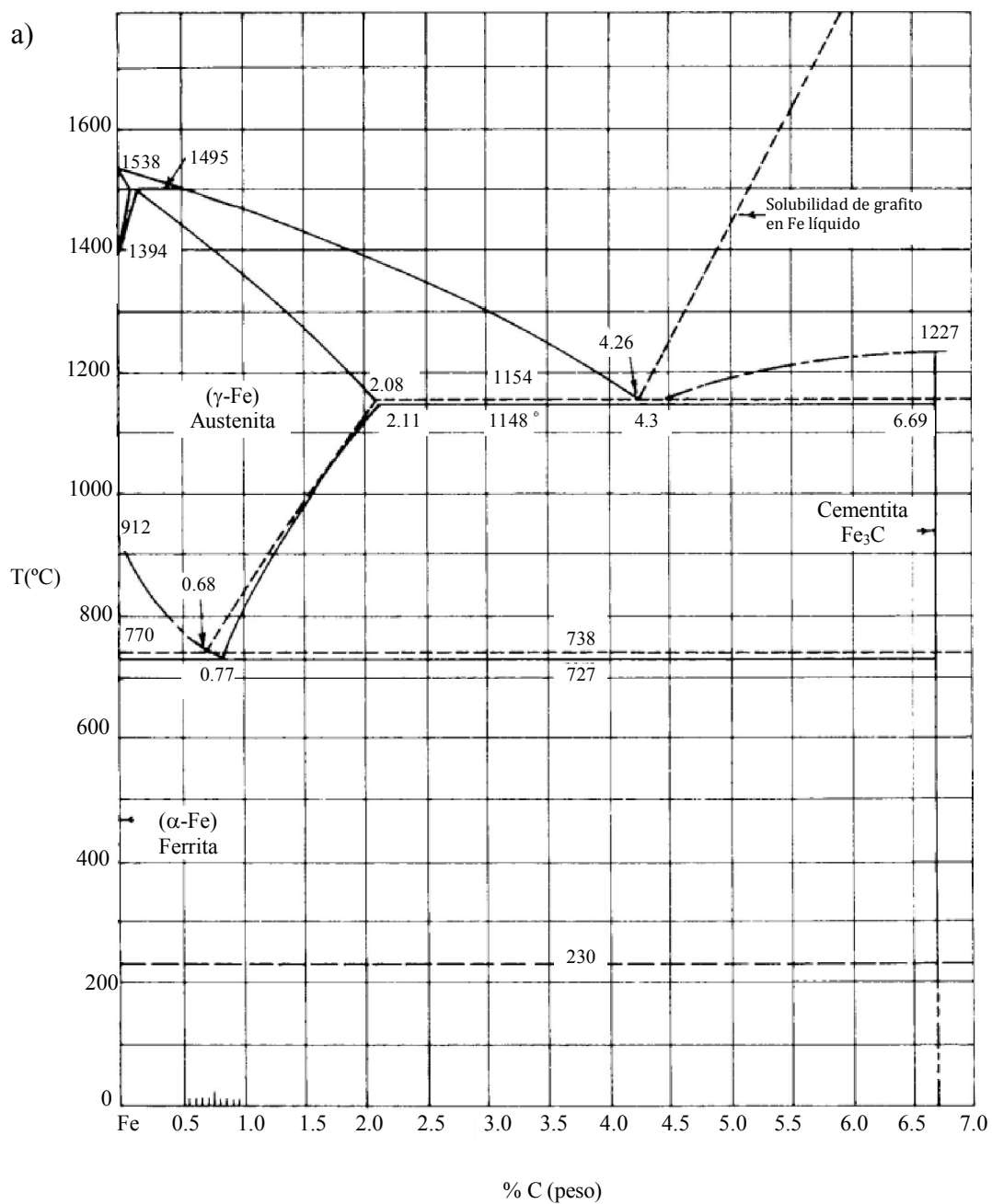
El acero exhibe un rango muy diverso de microestructuras que le otorgan diferentes combinaciones de resistencia y tenacidad. En la mayoría de los aceros esta versatilidad es posible modificando la descomposición de una ferrita  $\delta$  a alta temperatura a fase austenita  $\gamma$  a alta temperatura y luego descomponiendo la austenita hasta ferrita  $\alpha$  a baja temperatura cambiando la composición y la rapidez de enfriamiento. Incrementando aun mas la rapidez de enfriamiento se puede llegar a obtener una estructura de martensita [1].

Otra característica importante de los aceros es que todas las microestructuras ya mencionadas están fuera del equilibrio, es decir, la microestructura en condiciones de equilibrio a temperatura ambiente consistiría de ferrita  $\alpha$  y grafito. La microestructura de ferrita  $\alpha$  y perlita, la cual contiene láminas de ferrita y cementita, es la más cercana al equilibrio. En contraste, la microestructura de martensita tiene una estructura tetragonal centrada en el cuerpo (tcc) con carbono supersaturado y es la más lejana al equilibrio. Por lo tanto, el revenido de la martensita a alta temperatura se puede utilizar para obtener mezclas de fases intermedias que están más cercanas al equilibrio final lo cual provee otra metodología para controlar la microestructura y propiedades del acero.

En la Figura 1 se muestra el diagrama metaestable hierro-carburo de hierro [2]. Considerando una rapidez de enfriamiento relativamente lenta (condiciones de equilibrio), las fases ferrita, cementita y la mezcla de ellas, perlita, son los constituyentes principales de las microestructuras de aceros al carbono normales. Enfriando desde la región líquida la primera fase en solidificar es la ferrita  $\delta$ . Continuando el enfriamiento la ferrita  $\delta$  se transforma a austenita  $\gamma$ . A un mayor enfriamiento la austenita se transforma a ferrita  $\alpha$  y cementita.

La Figura 2 muestra el diagrama hierro-silicio (Fe-Si) [3]. Los diferentes contenidos de silicio y los ciclos de tratamiento térmico tendrán un efecto en la textura y la distribución del tamaño de grano como resultado de un diferente mecanismo de recuperación, recristalización y crecimiento de grano [4]. En aleaciones binarias Fe-Si, a

1100°C la fase es austenita cuando tienen 1% de silicio y ferrita en aleaciones que contienen 2.4 y 3% de silicio.



b)

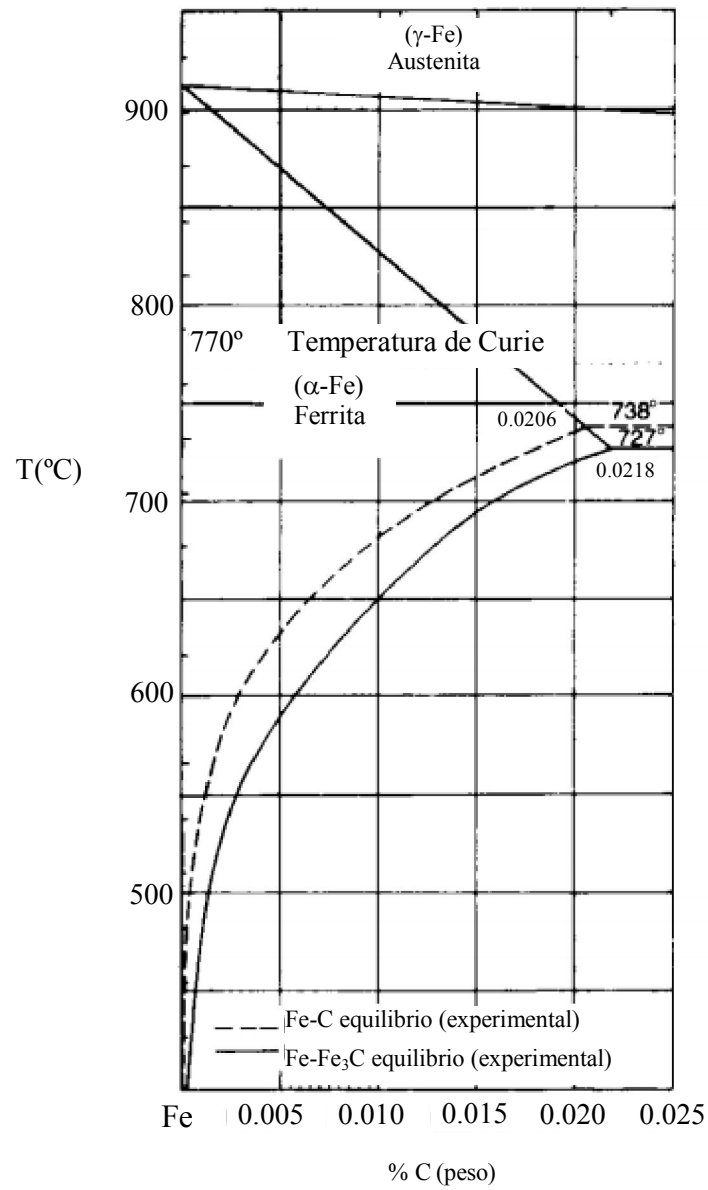


Figura 1. a) Diagrama metaestable hierro-carbono, b) Región ampliada en la zona de ferrita [2].

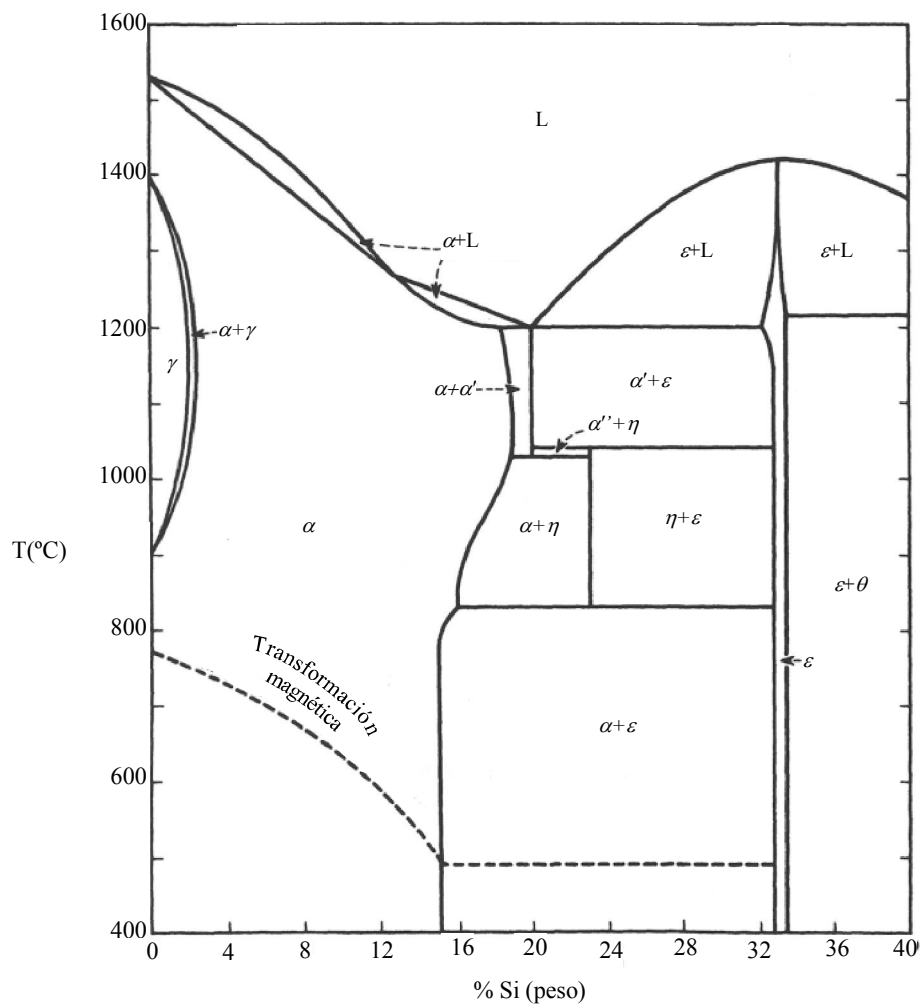


Figura 2.- Diagrama Fe-Si [3].

Con contenidos de carbono menores que 0.02%, las aleaciones hierro-silicio tienen un lazo gama que se extiende hasta un contenido de 2.5% de silicio, ver Figura 3. Como resultado, una aleación que contenga más de 2.5% de silicio tendrá una estructura cúbica centrada en el cuerpo en todas las temperaturas hasta el punto de fusión. Esto significa que la aleación recristalizará a cualquier temperatura sin un cambio de fase.



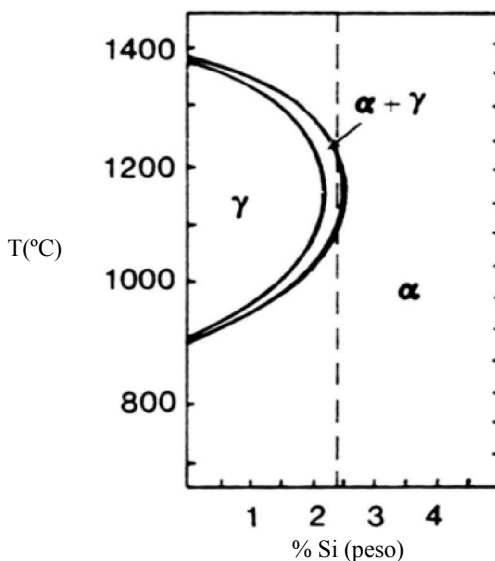


Figura 3.- Diagrama Fe-Si para aleaciones con 0.01 a 0.02% C [5].

## 2.2. Magnetismo

El magnetismo es un fenómeno físico en el que los materiales ejercen fuerzas de atracción o repulsión sobre otros materiales. En los tiempos antiguos se conocía muy poco sobre el magnetismo. El mineral que tiene la propiedad de atraer al hierro fue conocido por los chinos hace miles de años, así como por los griegos en la era de Tales (640-546 AC) quienes atribuían la propiedad a la posesión de un alma [6]. La piedra imán (en inglés llamada lodestone) que es un óxido de hierro magnético ( $\text{Fe}_3\text{O}_4$ ), era conocida por los chinos como la piedra del amor (thsuchy) y su aplicación principal era utilizarla como una brújula (llamada piedra guiadora). Los pastores en lo que era la antigua Turquía (Magnesia), encontraron que existía cierta atracción de sus bastones de hierro con estas rocas (Figura 4). El nombre regional se acopló al efecto y surgió por primera vez la palabra magnetismo [7,8].



Figura 4. Un pastor experimentando una fuerza magnética [7].

Una investigación detallada de la estructura atómica del hierro y otros materiales muestra que los espines de los electrones dentro de una red cristalina producen los efectos magnéticos. La alineación de los espines lleva a una distorsión de la red cristalina de hierro y llega a ser un poco más larga en la dirección de magnetización; este efecto se conoce como magnetostricción. Los átomos en un material magnético están agrupados en microscópicas regiones magnéticas a las cuales se les llama dominios magnéticos. En un material magnetizado los dominios se orientan (o se mueven) en una dirección específica y en el caso contrario estarán orientados aleatoriamente.

Cuando un material ferromagnético se expone a un campo magnético externo los dipolos atómicos se alinean con el campo externo. Al remover el campo externo, parte de la alineación será retenida, es cuando se dice que el material ha sido magnetizado. La relación entre la fuerza magnetizante ( $H$ ) y la densidad de flujo magnético ( $B$ ) no es lineal en estos materiales. Si la relación entre los dos se grafica para incrementos de la fuerza magnetizante, seguirá una curva hasta un punto donde un mayor incremento de ésta no resultará en un cambio de la densidad del flujo magnético, condición llamada saturación magnética, en la que casi todos los dominios magnéticos están alineados. Un material que no se ha magnetizado mostrará la curva punteada de la Figura 5 al incrementar  $H$ . Cuando  $H$  ha sido reducido a cero, la curva se moverá del punto a al punto b, en este punto se puede observar algo de flujo magnético remanente aún y cuando la fuerza magnetizante ha sido reducida a cero (llamado punto de retención en el cual solo algunos dominios magnéticos permanecen alineados).

Al invertir la fuerza magnetizante ahora la curva se moverá hacia el punto c, donde el flujo ha sido reducido a cero (punto llamado de coercitividad). Al seguir incrementando a la fuerza magnetizante en la dirección negativa, el material nuevamente se saturará magnéticamente pero ahora en dirección opuesta (punto d). Al reducir  $H$  a un valor de cero se llega al punto e, comportamiento similar al del punto b pero en dirección opuesta. Al incrementar nuevamente  $H$  en la dirección positiva, la curva se moverá hacia el punto f, donde nuevamente  $B$  es cero. La curva resultante es llamada lazo de histéresis (ver Figura 5).

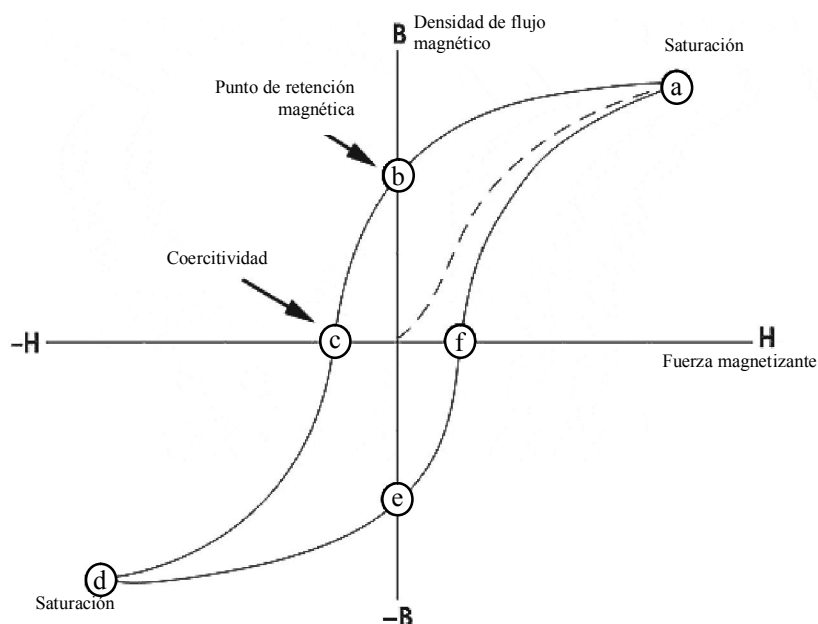


Figura 5.- Lazo de histéresis.

A partir del lazo de histéresis, se pueden obtener algunas propiedades magnéticas importantes para los aceros eléctricos tales como la fuerza coercitiva (punto c) y la permeabilidad (relación  $B/H$ ).

La propiedad única de los materiales ferromagnéticos está en la habilidad de controlar el desarrollo de grandes cantidades de flujos magnéticos lo cual puede involucrar por sí mismo actividades electromagnéticas. Cuando la estructura de un material responde a los campos aplicados en una forma fácil y reversible, al material se

le refiere como magnéticamente suave. Cuando la estructura cristalina se organiza de tal forma que el movimiento de la pared del dominio requiere de una gran cantidad de campo magnético, y cuando la magnetización lograda permanece por mucho tiempo cuando se remueve el campo externo, al material se le refiere como magnéticamente duro [7].

### 2.3. Historia del desarrollo de los aceros eléctricos

A finales del siglo XIX se encontró que al elevar la resistividad del hierro aleándolo con silicio ayudó a restringir el flujo de corrientes parásitas. La Figura 6 muestra la relación entre la resistividad eléctrica con el contenido de silicio.

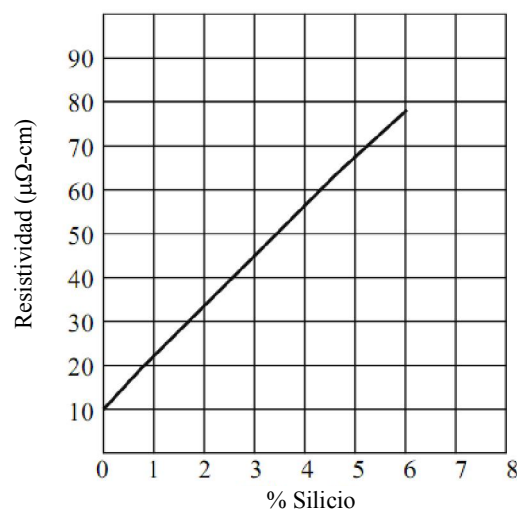


Figura 6. Relación entre el contenido de silicio con la resistividad eléctrica [7].

Se reportan los primeros trabajos de investigación sobre las propiedades mecánicas de aleaciones que contenían varias cantidades de silicio en 1889; de ahí se empezó a hacer el énfasis en las propiedades magnéticas estudiadas por Barrett, Brown y Hadfield en 1900 [9]. Las primeras láminas de acero eléctrico Fe-Si comercial emergieron en Estados Unidos en 1905 y en Inglaterra en 1906 (llamadas en ese tiempo láminas eléctricas). Las versiones iniciales de los aceros eléctricos fueron producidas mediante una laminación en caliente utilizando molinos manuales. El acero eléctrico producido

mediante este método era isotrópico en propiedades, es decir, las propiedades magnéticas y mecánicas eran casi las mismas en la dirección de laminado y en la dirección perpendicular y se podían manejar contenidos de silicio de hasta 4.5%, sin embargo, arriba de este porcentaje el acero comienza a exhibir fragilidad [7]. La llegada de laminación en frío de cintas, iniciada en los Estados Unidos, abrió la puerta para la laminación a alta velocidad utilizando molinos reversibles. Los primeros trabajos relacionados al efecto de impurezas sobre las propiedades magnéticas se atribuyen a Yensen en Estados Unidos (1915) y a Gumlich en Alemania (1924) [9].

Norman P. Goss [9,10] desarrolló un proceso de orientación de granos en 1934 después de encontrar que al realizar un laminado en frío seguido de un tratamiento de recocido llevaba a un crecimiento selectivo de granos con direcciones fáciles de magnetizar en la lámina en la dirección de laminado. La aleación Fe-Si con grano orientado con la textura (110)[001] fue producido comercialmente por primera vez en 1939 [10].

Las propiedades particulares del acero laminado en frío dependen mucho de la dirección en la que son procesados (textura). La textura cúbica (100)[001] fue reportada por primera vez para una aleación de hierro con 3% de Si por Assmus en 1956 [11]. Se detallará más información sobre textura en el capítulo 3.

## 2.4. Propiedades magnéticas y aplicaciones de los aceros eléctricos

El hierro tiene una estructura cúbica centrada en el cuerpo (CC) a temperatura ambiente y dentro de un cristal de hierro en el cual hay espines electrónicos que se han alineado espontáneamente para dar una autosaturación, existen direcciones que son magnetizables más fácilmente que otras, este efecto se muestra en la Figura 7.

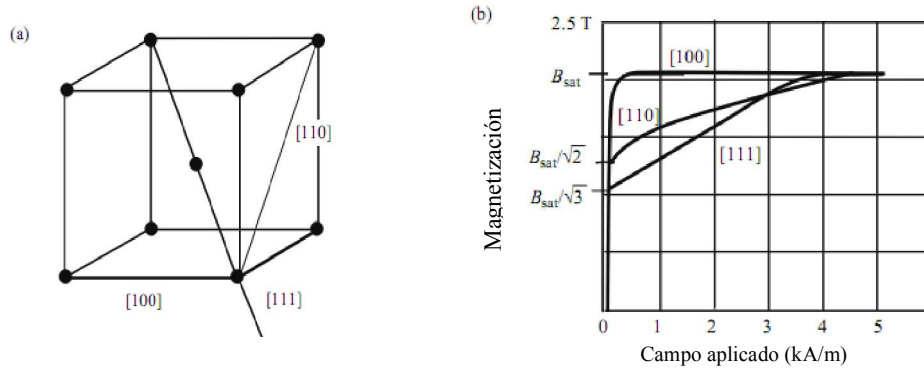


Figura 7. a) Estructura CCC, la dirección [111] es una diagonal del cuerpo, la dirección [110] es una diagonal de una cara y la dirección [100] es el borde de un cubo. b) Magnetización relativa en varias direcciones [7].

Con un procesamiento termomecánico adecuado, es decir, mediante la aplicación de una serie de operaciones de laminado y de tratamientos térmicos, es posible generar granos que crezcan en una dirección paralela a la de laminación. Tal material tendrá propiedades magnéticas mejoradas en esta dirección pero propiedades pobres en la dirección transversal ( $90^\circ$  de la dirección de laminación). Tales propiedades no son deseadas en las máquinas rotatorias pero son útiles para transformadores en los que se desea un flujo unidireccional.

En forma general los aceros eléctricos son categorizados como aceros eléctricos de grano orientado y aceros eléctricos no orientados. El primero se utiliza principalmente en transformadores y el segundo se utiliza en generadores, motores y transformadores pequeños y su consumo es mucho mayor comparado con el anterior.

La dirección cristalográfica óptima de magnetización en aceros Fe-3%Si para transformadores de potencia es la dirección [001]. Por lo tanto el procesamiento de estos aceros está dirigido a la fabricación de un producto con una alta proporción de granos orientados en la dirección [001] coincidiendo con la dirección en la cual el producto ha sido laminado. La Figura 8 muestra como ejemplo la dependencia de las pérdidas rotacionales con la orientación para un acero eléctrico con 3% de silicio. Esta figura

indica que el cristal más favorable es el (001), seguido del (110). Los planos (111) y (112) no son deseables [12]. Este mismo efecto sucede para la permeabilidad.

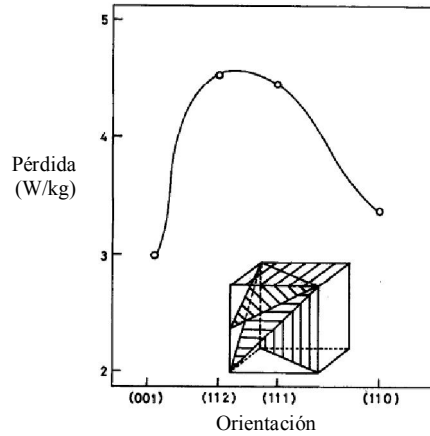


Figura 8. Dependencia de la orientación cristalina de las pérdidas rotacionales en un acero con 3% de Si [12].

Esto refleja la dependencia de las propiedades magnéticas con la orientación preferencial, conocido como textura.

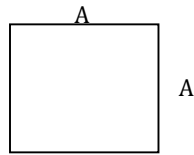
La laminación restringe a las corrientes parásitas de tal forma que se reduce la pérdida de potencia que se manifiesta como disipación de calor. El calor puede ser producido en un generador, en líneas de transmisión y en motores eléctricos, lo cual limita la cantidad de potencia que puede ser entregada [13]. Si al voltaje  $V$  se le relaciona con la sección transversal y a la resistencia  $R$  con la periferia, entonces la corriente estaría dada por la ecuación (2.1):

$$I \propto \frac{V}{R} \propto \frac{\text{Área transversal}}{\text{Periferia}} \quad (2.1)$$

La pérdida de potencia se puede obtener mediante el efecto Joule, ecuación (2.2):

$$P \propto I^2 R \quad (2.2)$$

Considerando una sección completa de medidas  $A \times A$  (un sólido) se tendría:

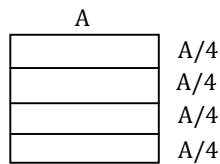


$$I \propto \frac{A^2}{4A}, \text{ es decir } \propto \frac{A}{4} \quad (2.3)$$

$$R \propto 4A \quad (2.4)$$

$$\therefore P \propto \frac{A^3}{4} \quad (2.5)$$

Ahora si se considera un cuarto de la sección completa:



$$I \propto \frac{A^2/4}{5A/2}, \text{ es decir } \propto \frac{A}{10} \quad (2.6)$$

$$R \propto 5A/2 \quad (2.7)$$

$$\therefore P \propto \frac{A^3}{40} \quad (2.8)$$

De acuerdo a lo obtenido en la ecuación (2.8) para cuatro cuartos la pérdida de potencia sería proporcional a  $A^3/10$  que es un 60% menos de pérdida que la sección completa. Si se utilizaran 100 secciones mediante una ruta similar la pérdida sería 98% menos de pérdida que el sólido completo. Sin embargo, las láminas no deben ser exageradamente delgadas ya que pueden inducir otros componentes de pérdidas magnéticas y las superficies podrían actuar como sitios de anclaje para el movimiento de los dominios magnéticos. Por lo tanto se manejan láminas con rangos de 0.2 a 1 mm de espesor, es decir, el espesor es un parámetro importante en la predicción de pérdidas de potencia [7].

La presencia de inclusiones no metálicas en el acero daña sus propiedades magnéticas. Esto se origina porque cuando se cambia la magnetización, las paredes del dominio deben moverse pero son ancladas y obstruidas por las inclusiones no metálicas [14,15]. Consecuentemente es importante restringir cuidadosamente la presencia de los elementos que producen inclusiones no metálicas. Los principales elementos son el



carbono, nitrógeno, oxígeno y el azufre por lo que es deseable reducirlos a un mínimo durante el procesado del acero.

Las propiedades magnéticas son afectadas por el tamaño de grano. Con granos grandes la presencia de la frontera de grano es menor por unidad de volumen. Las fronteras de grano también actúan como sitios de anclaje para los dominios por lo que granos grandes reducen la cantidad total de obstrucción del movimiento de la pared por unidad de volumen [15].

Se ha reportado que para aceros de grano orientado puede haber tratamientos térmicos preliminares (por ejemplo un normalizado) en los rollos provenientes del proceso de laminación en caliente previo al laminado en frío para homogeneizar la microestructura y suavizar el material para un procesado más eficiente durante la laminación en frío lo cual puede ayudar al crecimiento de grano durante los procesos de recristalización en el proceso del recocido [16].

También puede ocurrir un envejecimiento magnético debido a la precipitación del carbono y el nitrógeno cuando se excede el límite de solubilidad a la temperatura de trabajo del componente eléctrico [10,17]. El envejecimiento magnético resulta en una degradación de las propiedades magnéticas durante el tiempo de trabajo del acero eléctrico. Durante el tratamiento térmico puede no haber suficiente tiempo para que ocurra una precipitación. Como consecuencia puede originarse la precipitación en forma de partículas dispersas cuando el material se encuentra en servicio. El anclaje de los dominios magnéticos debido a la precipitación está relacionado a un incremento de la fuerza coercitiva [10,17], es decir, será más complicado remover el magnetismo residual en el material, lo que significa que será más difícil desmagnetizarlo. Este efecto se puede contrarrestar con contenidos de silicio mayores al 3%. El aluminio se ha reportado que inhibe el envejecimiento magnético con contenidos mayores a 5% en peso [18].

Cuando cambia el tamaño de grano,  $d$ , manteniendo otros factores sin cambio, la pérdida de histéresis varía proporcionalmente a  $1/d$  y la pérdida por corrientes parásitas

varía casi proporcional a  $d$  [12,18]. Por lo tanto, las pérdidas totales alternas se harán mínimas al obtener un tamaño de grano óptimo que se determina mediante la composición del material [19]. La Figura 9 muestra esta tendencia para un acero eléctrico.

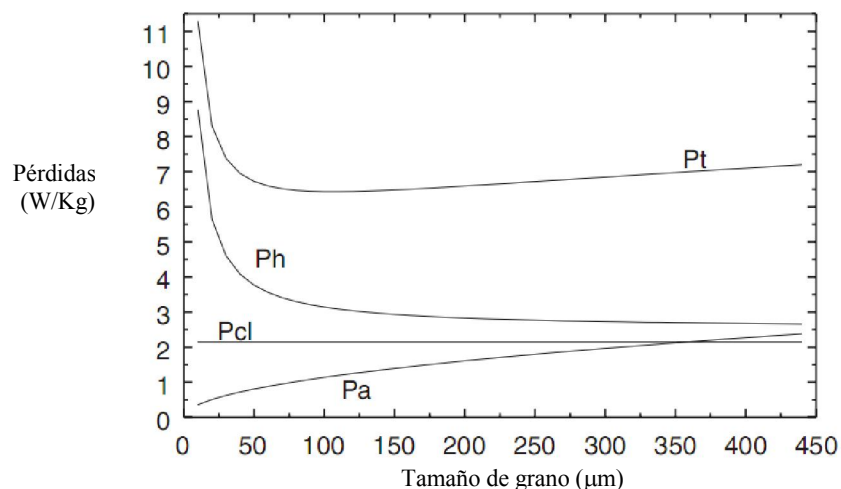


Figura 9. Influencia del tamaño de grano en la pérdidas en un acero eléctrico.  $P_h$ =Pérdidas de histéresis,  $P_a$ = Pérdidas en exceso,  $P_{cl}$ =Pérdidas por corrientes parásitas,  $P_t$ =Pérdidas totales [20].

Debido a razones termodinámicas, se ha encontrado que el espaciamiento de las paredes de los dominios incrementa al aumentar el tamaño de grano. Esto significa que si el espaciamiento de la pared del dominio es grande, entonces las paredes individuales deberán moverse a una velocidad más alta para que se realice el cambio de magnetización en el tiempo disponible. Una pared que se mueva a alta velocidad resulta en la generación de micro-corrientes parásitas asociadas con el vector de rotación de magnetización y esto resultará en pérdidas de potencia extras. Por lo tanto existe un límite en el tamaño de grano para evitar estas pérdidas [20].

La deformación plástica es otro factor importante que afecta a las propiedades magnéticas [21]. Se ha publicado que las pérdidas magnéticas son directamente proporcionales a la densidad de dislocaciones y tienen una dependencia de raíz cuadrada a la deformación durante la laminación [22]. La Figura 10 muestra el efecto de la deformación en las pérdidas magnéticas para un acero eléctrico de grano no orientado.

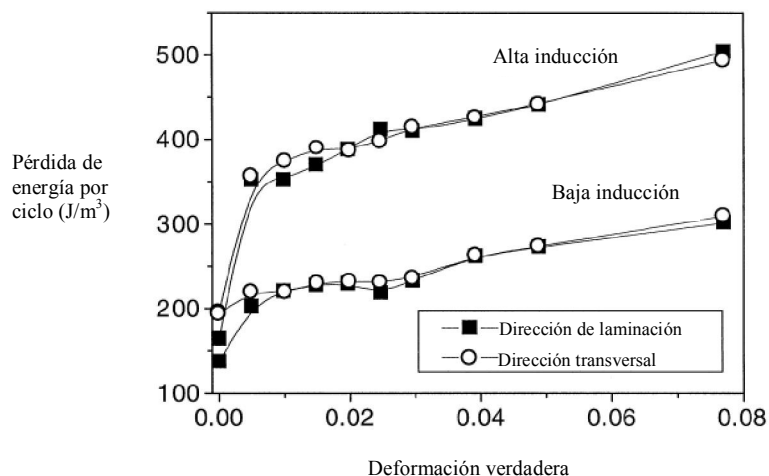


Figura 10.- Efecto de la deformación verdadera  $\epsilon$  en los componentes de pérdida de baja y alta inducción para un acero eléctrico [22].

El efecto de la deformación plástica en la fuerza coercitiva también es conocido, en la que se tiende a incrementar el área del lazo de histéresis resultando en una mayor coercitividad y por lo tanto en mayores pérdidas magnéticas [23-25]. La deformación plástica resulta en la formación de nuevas dislocaciones y en un incremento de la densidad de dislocaciones al progresar la deformación.

La coercitividad tiene una dependencia de raíz cuadrática con la densidad de dislocaciones. La densidad de dislocaciones afecta el movimiento de las paredes de los dominios magnéticos y el anclaje de éstos, sometiendo al material a esfuerzos residuales [24]. El efecto de esto será un desplazamiento en el lazo de histéresis a un valor  $H$  más alto y por lo tanto disminuye la pendiente del lazo de histéresis, Figura 11.

También se ha reportado en la literatura que las impurezas presentes en el material, dislocaciones y fronteras de grano afectan a la resistividad eléctrica [26].

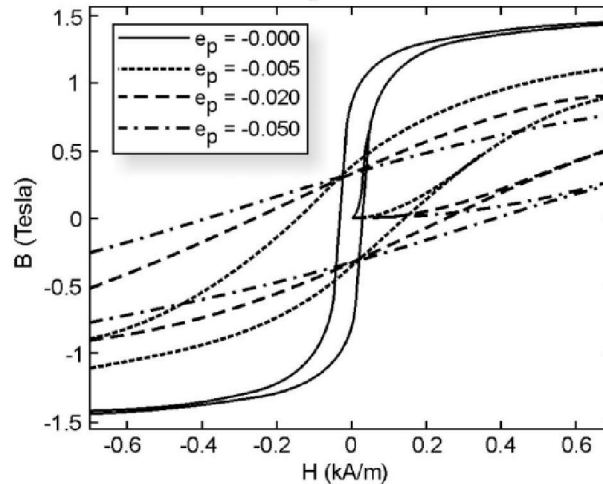


Figura 11.- Curvas de histéresis a diferentes niveles de deformación plástica,  $e_p$  [23].

Los esfuerzos compresivos dañan las propiedades magnéticas por lo que se requiere de un tratamiento de relevado de esfuerzos para optimizar las propiedades magnéticas. El método usual es la aplicación de un tratamiento de recocido de tal forma que los átomos puedan relajarse y regresar a las posiciones de equilibrio. Se recomienda que este tratamiento sea la última operación de proceso del acero [27]. En forma opuesta, los esfuerzos de tensión facilitan el proceso de magnetización y reducen la pérdida por histéresis [10]. Se pueden utilizar recubrimientos con un coeficiente de expansión térmica menor que la del sustrato para introducir estos esfuerzos favorables [28]. Sin embargo, se deben evitar esfuerzos elásticos de flexión ya que éstos promueven un aumento en la coercitividad y en la pérdida por histéresis.

La pérdida total consiste de la pérdida de histéresis y la pérdida por corrientes parásitas. Los factores físicos que determinan la pérdida total son los siguientes [20,29]:

Pérdida de histéresis: orientación del cristal, pureza (inclusiones, precipitados), esfuerzos internos y condiciones de la superficie. En un acero eléctrico no orientado esta pérdida puede representar hasta un 80% del valor total.

Pérdida por corrientes parásitas: resistividad eléctrica (contenido de silicio), espesor de la lámina, tamaño de grano y esfuerzo de tensión elástico.

A continuación se muestran algunos requerimientos para las principales aplicaciones de los aceros eléctricos en un mundo donde la demanda energética crece día a día:

Transformadores: se requiere de bajas pérdidas en el hierro en el uso de transformadores. En el mundo se utilizan aceros con grano orientado casi en forma exclusiva para transformadores de potencia y de distribución [10].

Grandes generadores: las pérdidas en el hierro representan un 8 a 10% de las pérdidas totales en un turbogenerador por lo que en una máquina grande, la cual es difícil de enfriar, se requiere de un material con pocas pérdidas de hierro. Por lo tanto se pueden utilizar láminas de acero con altos grados de silicio ya sea de grano orientado o aceros eléctricos no orientados los cuales presentan bajas en pérdidas en el hierro [10,12].

Motores medianos y grandes: en motores medianos y grandes, se requiere de un material con bajas pérdidas en el hierro y una alta permeabilidad. Para motores de grandes capacidades, sin embargo, la importancia está más inclinada en las pérdidas en el hierro debido a que resultará en menos radiación de calor desde la superficie. En forma contraria para motores de pequeña capacidad, es más importante la permeabilidad [12].

Pequeños motores: los pequeños motores se representan por motores de inducción de una sola fase y son utilizados ampliamente para productos electrodomésticos. Dado que estos motores tienen muy pequeña capacidad y bajo costo, se utilizan láminas de acero al silicio no orientado [12].

# CAPÍTULO 3

## TEXTURA

### 3.1. Introducción

La orientación cristalográfica, o simplemente orientación, se refiere a la posición de los planos atómicos de los granos en un volumen de un cristal respecto a una referencia fija. En la mayoría de los materiales existe un patrón en las orientaciones y esto ocurre durante una cristalización a partir de un estado líquido o un estado sólido y subsecuentemente, mediante un proceso termomecánico. Esta tendencia se conoce como orientación preferencial, o en forma más concisa, textura. Se ha establecido que la influencia de la textura en las propiedades del material es en muchos casos del 20% al

50% de los valores de las propiedades [30]. Algunos ejemplos de propiedades que dependen de la textura promedio de un material son:

- Módulo de elasticidad ( $E$ ).
- Razón de Poisson ( $\nu$ ).
- Resistencia.
- Ductilidad.
- Tenacidad.
- Permeabilidad magnética.
- Conductividad eléctrica.
- Expansión térmica (en materiales que no tienen estructura cúbica).

El análisis de los cambios de textura durante un tratamiento térmico y mecánico en los materiales proporciona información importante acerca de los mecanismos que participan, incluyendo: la deformación, la recristalización o las transformaciones de fase.

El procesamiento del acero involucra por lo menos cinco distintos conjuntos de mecanismos de desarrollo de la textura [31]:

1. Deformación de austenita (por ejemplo, durante el laminado en caliente).
2. Recristalización de austenita (durante y después del laminado en caliente).
3. Transformación austenita a ferrita (enfriamiento después del laminado).
4. Deformación de ferrita (por ejemplo, durante el laminado en frío).
5. Recristalización estática durante el recocido después del laminado en frío.

## 3.2. Medición de la textura

El método más común para medir la textura era mediante difracción de rayos X. Con este método se obtiene una medición de la fracción volumétrica de una familia de planos (por ejemplo la familia de planos  $\{111\}$ ), la cual se orienta para la difracción. Sin embargo, este método no informa como se distribuyen los granos en todo el material.

Por lo tanto, la textura que se obtiene es un valor promedio para todo el volumen muestreado, típicamente siendo miles de granos. Se tienen dos formatos aceptados para reportar la textura: figuras de polos y mediante la función de distribución de orientaciones (ODF, por sus siglas en inglés). Las figuras de polos se emplean solamente donde éstas faciliten el entendimiento de los mecanismos básicos involucrados. La Figura 12 muestra varias figuras de polos para un acero eléctrico recocido a diferentes temperaturas después de haberse laminado previamente en caliente y en donde se puede apreciar el efecto del tratamiento térmico sobre la textura del acero.

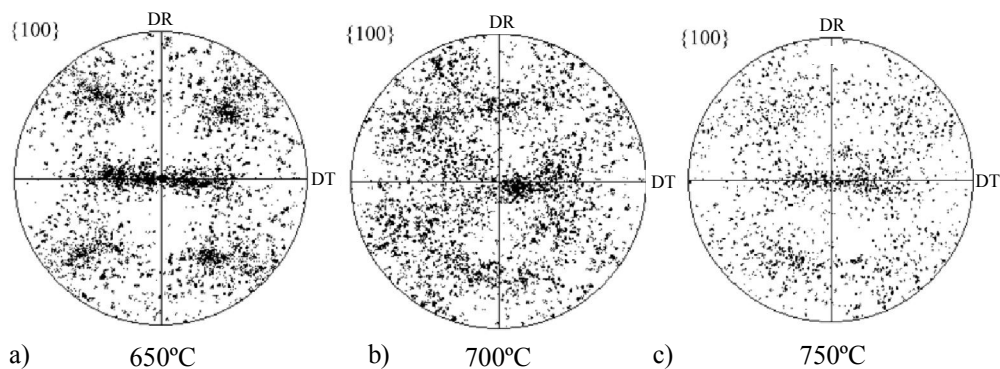


Figura 12.- Figuras de polo para un acero eléctrico con 2.4% Si, recocido a: a) 650 °C, b) 700 °C y c) 750°C, [4].

La función de distribución de orientaciones se define como una función que describe la intensidad o probabilidad con la cual una orientación dada aparece en la textura correspondiente.

Se puede utilizar la textura para analizar la estadística de la orientación de una población de granos individuales y considerar la ubicación espacial de estos granos (topografía). Esto permitiría estudiar los siguientes fenómenos [30]:

- Efectos locales en las propiedades: El efecto de las variaciones de las propiedades se magnificará donde los granos se agrupan en clústeres más que en forma individual. Por ejemplo, la transmisión de deslizamiento se puede facilitar entre granos de orientaciones favorables (granos contiguos como los que se muestran en la Figura 13).



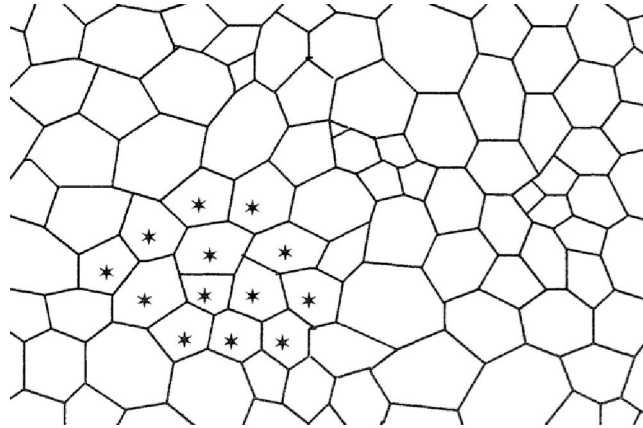


Figura 13.- Granos contiguos [30].

- Parámetros interfaciales: Si se conocen las orientaciones individuales es posible calcular la diferencia de orientación entre los granos vecinos, y por lo tanto, proveer información acerca de la distribución de las fronteras de grano, a veces llamada mesotextura.
- Parámetros morfológicos o geométricos de los granos: Un análisis de microtextura permite establecer una relación entre los parámetros geométricos y la orientación de los granos.
- Relaciones entre las fases: Se puede obtener la textura de cada fase, la distribución de sus orientaciones y las relaciones de orientación entre los cristales individuales de cada fase.
- Medición directa de las distribuciones de orientación cristalográfica: Las ODF obtenidas mediante la medición de microtextura dan la distribución de la orientación real de los granos analizados.

Un método común y eficiente para medir la microtextura es mediante difracción por electrones retrodispersados (EBSD, por sus siglas en inglés). La técnica se basa en posicionar la muestra dentro de la cámara del microscopio electrónico de barrido (MEB) de tal forma que se hace un ángulo de  $20^\circ$  entre el haz de electrones incidente y la

superficie de la muestra. Esto permite que ocurra la difracción de los electrones retrodispersados y que escapen de la superficie de la muestra. El patrón resultante de difracción se captura en tiempo real y un algoritmo de computadora se encarga de obtener la orientación de cada patrón de difracción a partir del cual se obtiene la microtextura.

Para definir una orientación, se requieren dos sistemas de coordenadas, uno que relacione a toda la muestra y otro que relacione al cristal; típicamente se eligen sistemas cartesianos. Los ejes de la muestra se eligen de acuerdo a superficies o direcciones importantes asociadas con la forma de la muestra. Por ejemplo, para un producto laminado, las direcciones asociadas son la dirección de laminación (DR), dirección a través del espesor (normal al plano de laminado, DN) y la dirección transversal (DT), ver Figura 14. El segundo sistema de coordenadas, llamado sistema del cristal, se especifica con direcciones [100], [010] y [001] para cristales cúbicos, tetragonales y ortorrómbicos.

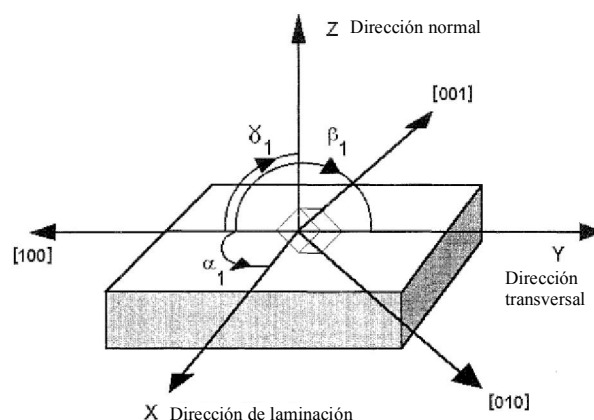


Figura 14.- Sistemas local (XYZ) y del cristal ([100],[010],[001]), [30].

Existe un sistema coordenado en el cual la orientación se puede expresar mediante solo tres parámetros llamados ángulos de Euler, los cuales forman un sistema conocido como espacio de Euler. Los ángulos de Euler son tres rotaciones, que al seguir una cierta secuencia, transforman al sistema coordenado de la muestra al sistema coordenado del

crystal. Las rotaciones más comúnmente utilizadas son las de Bunge ( $\phi_1$ ,  $\Phi$  y  $\phi_2$ ) y se expresan en la Figura 15.

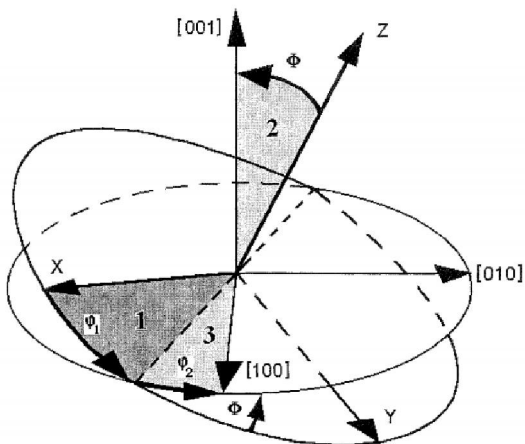


Figura 15.- Ángulos de Euler [30].

La Figura 16 muestra una vista tridimensional del espacio de Euler.

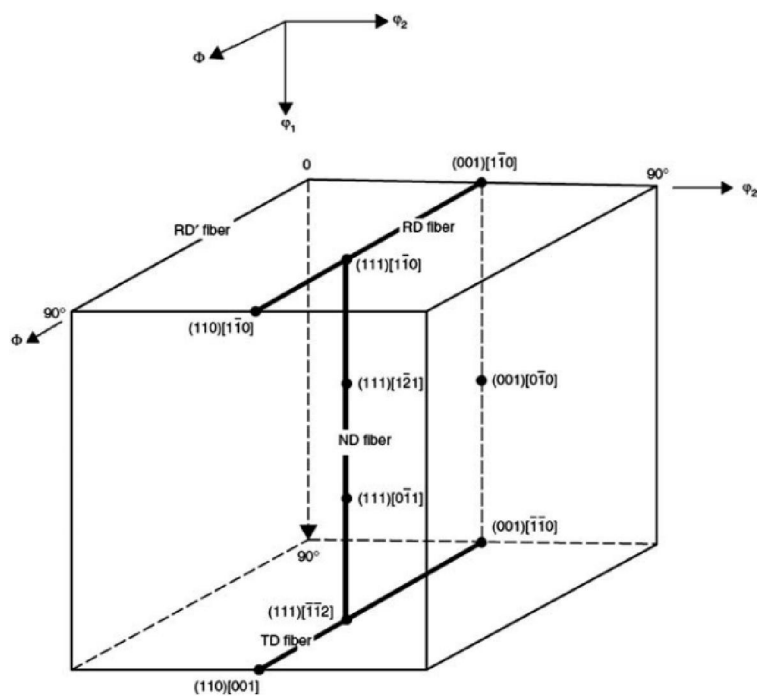


Figura 16.- Vista tridimensional del espacio de Euler (notación de Bunge) [30].

La Figura 17 muestra una distribución de orientaciones cristalográficas en dos dimensiones para un acero con 2% de silicio recocido a 1000 °C.

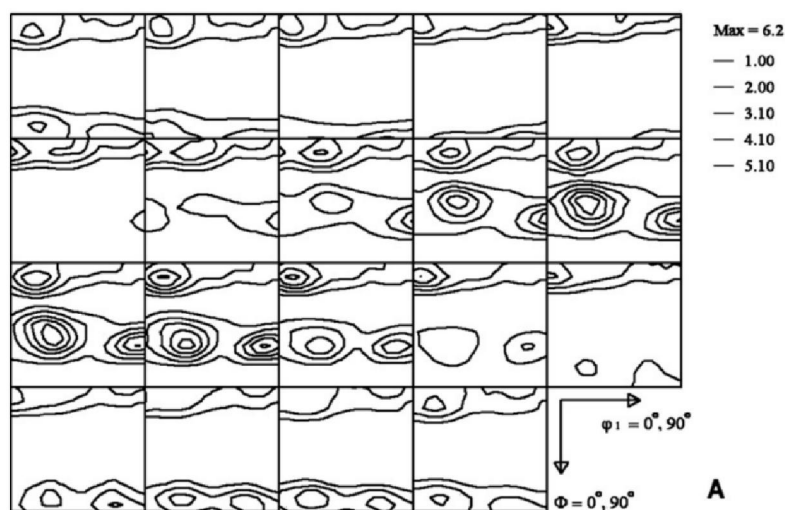


Figura 17.- Distribución de orientación cristalográfica para un acero eléctrico recocido a 1000°C [32].

Las aleaciones Fe-Si son particularmente interesantes debido a la observación frecuente del crecimiento preferencial de los granos con orientaciones  $\{110\}\langle 001\rangle$  (notación de Miller), esto es, la dirección normal de los planos  $\{110\}$  del cristal paralela a la normal de la muestra y direcciones  $\langle 001\rangle$  paralelos a la dirección de laminado. Estos granos son descritos como aquellos que tienen una orientación de Goss (ver Figura 18) y su crecimiento selectivo se describe como discontinuo y anormal [33,34].

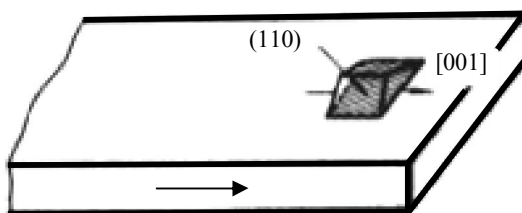


Figura 18.- Textura de Goss.

Una transformación discontinua es aquella que se inicia en sitios locales resultando en una interfase distinta entre las características microestructurales nuevas y la que aún no se ha transformado, lo que implica que ocurrirá un crecimiento anormal en sitios

espacialmente heterogéneos en el material. Al proceso de selección se le da el nombre de crecimiento anormal de grano o recristalización secundaria, los cuales son términos que se utilizan de manera intercambiable en la literatura de los aceros eléctricos [35].

En la sección 2.4 se mencionaron algunas aplicaciones de los aceros eléctricos según fueran de grano orientado o no orientado. Estos nombres se refieren a aceros donde una fracción volumétrica significativa de la microestructura comprende granos con orientación de Goss (orientados) y aceros en donde la distribución estadística de las orientaciones es más uniforme (no orientados). La orientación de Goss se obtiene mediante una serie de procesos termomecánicos y de tratamientos térmicos en el acero eléctrico con el objetivo de alinear los planos y direcciones cristalográficas en el material con el plano y dirección de laminado respectivamente.

Los factores principales que afectan a la permeabilidad en los aceros eléctricos son el contenido de silicio y la textura. El efecto de la textura en la permeabilidad es el mismo que el efecto en las pérdidas en el hierro, es decir, la orientación (001) es la más deseable, seguida de la orientación (110), ver Figura 8.

## CAPÍTULO 4

# TRANSFORMACIONES DE FASES

### 4.1. Mecanismos de transformación de fases

Una fase puede ser definida como un ensamble de átomos o moléculas las cuales están en equilibrio bajo restricciones externas (por ejemplo, la temperatura o la presión) y es una región físicamente distinguible y homogénea. Cada una de estas regiones puede ser distinguida mediante un conjunto común de parámetros que definen propiedades intrínsecas tales como densidad, composición, entre otros.

Dos fases serán distintas si éstas representan diferentes arreglos estructurales en el sólido o tienen diferentes composiciones. Una de las razones por las cuales existe una gran variedad de microestructuras en los aceros se debe a la gran variedad en la que los átomos pueden moverse durante la transformación para producir el cambio en la estructura del cristal. Al estudiar las transformaciones de fases se deben de entender las razones por las que ocurren y sus mecanismos.

Para entender las razones por las que ocurren las transformaciones de fase se deben considerar las propiedades de los diferentes arreglos de un ensamble de átomos o moléculas para encontrar la configuración de equilibrio. El problema consistirá en una evaluación termodinámica para representar los parámetros macroscópicos a partir de las propiedades de los átomos aislados o moléculas.

En el caso de los mecanismos de transformación, el uso de los métodos termodinámicos clásicos llega a ser limitado, dado que las transformaciones involucran cambios naturales. En este caso se recurre a teorías cinéticas. Los modelos a ser utilizados son de dos tipos: el primero requiere de una descripción de la estructura ideal, utilizando aproximaciones para las fuerzas interatómicas para que puedan ser tratadas matemáticamente, y el segundo considera los defectos cristalinos que ocurren en materiales sólidos reales. Las vacancias, los intersticios, las dislocaciones, las fallas de apilamiento y las fronteras de grano no son comparativamente importantes en una descripción del estado de equilibrio, pero su presencia puede ser fundamental para el proceso de transformación [36].

Cualquier transformación de fases requiere de un rearrreglo de la estructura atómica. En el estado sólido pueden ocurrir rearrreglos similares durante los procesos que no requieren transformación de fase, por ejemplo, durante la recristalización de un material deformado o su subsecuente crecimiento de grano. Tales reacciones se distinguen por sus energías de activación, los átomos toman nuevas posiciones relativas bajo la influencia de una energía de deformación, una energía superficial o un esfuerzo externo.

La energía de activación de cualquier transformación es la diferencia de energías libres (usualmente la energía libre de Gibbs) de los estados inicial y final. Por lo tanto, está determinada por parámetros termodinámicos apropiados a grandes regiones de la fase considerada. La energía de activación puede ser tomada como la barrera que debe ser superada para que la transformación se lleve a cabo.

El modo de transformación es muy dependiente del efecto de pequeñas fluctuaciones a partir del estado inicial, y de si la fluctuación eleva o disminuye la energía libre. Un ensamble metaestable es resistente a todas las posibles fluctuaciones y cualquier ruta de transformación debe pasar a través de estados de energía libre más alta. En forma contraria, si una fluctuación infinitesimal es capaz de disminuir la energía libre, la condición inicial será inestable y por lo tanto no habrá barrera energética para la transformación a lo largo de la ruta representada por esta fluctuación.

Una fase verdaderamente inestable solo tiene una existencia transitoria. Pero también puede ser posible obtener una fase de tal forma que la única barrera de transformación sea un movimiento atómico limitado o difusión. Tal ensamble también puede ser descrito como inestable aunque se descompone a una razón finita determinada por la rapidez de difusión. Considerando el problema de estabilidad, Gibbs distinguió dos tipos de fluctuaciones. Las primeras corresponden a cambios muy drásticos en el rearrreglo atómico dentro de volúmenes localizados muy pequeños. Las segundas corresponden a cambios muy pequeños en los rearrreglos acomodados en grandes volúmenes [1].

En la transformación heterogénea hay una etapa intermedia en la que el ensamble puede ser dividido en regiones microscópicamente distintas de las cuales algunas ya se transformaron y las restantes no. La transformación entonces comienza a partir de centros identificables en la fase original, proceso conocido como nucleación. La teoría clásica de la formación de un núcleo se basa en las fluctuaciones del primer tipo y cualquier ensamble es estable a tales fluctuaciones en una escala suficientemente pequeña.



La razón para la barrera de energía libre usualmente se expresa en la forma de que el cambio en la energía libre negativa resultado de la formación de un volumen dado de una fase más estable se opone al cambio en la energía libre positiva debido a la creación de una interfase entre la fase inicial y la nueva fase. Conforme disminuye el volumen de la región transformada el término positivo de la superficie debe eventualmente dominar al término de volumen negativo de tal forma que la energía libre total se hace positiva.

Para fluctuaciones localizadas de cualquier tipo hay un tamaño crítico del núcleo en la cual la barrera de energía libre es un máximo y la magnitud de este incremento máximo en energía libre determina la rapidez de nucleación. Si la energía superficial disminuye el tamaño crítico del núcleo y la altura de la barrera de energía también disminuyen y se formarán más y más núcleos en un volumen dado a un tiempo dado. En el límite, la barrera de nucleación desaparece completamente cuando la energía superficial es cero, o es muy pequeña, y la fase original se hace inestable. La transformación se presentará en todas las partes del ensamble simultáneamente.

En las transformaciones de nucleación y crecimiento (difusionales), la nueva fase crece a expensas de la fase vieja mediante una migración relativamente lenta de la frontera de la interfase y el crecimiento resulta de átomo por átomo a través de esta frontera. Los átomos se mueven independientemente y a una rapidez que depende de la temperatura. A una cierta temperatura la reacción ocurre en forma isotérmica y la cantidad de la nueva fase formada incrementa con el tiempo. Aunque el volumen de la región transformada difiere en general de su volumen inicial, su forma es substancialmente inalterada. Las transformaciones difusionales son posibles en todas las fases metaestables y la condición inicial puede ser sólida, líquida o gaseosa.

Las transformaciones sin difusión son solo posibles en el estado sólido y utilizan un movimiento cooperativo de muchos átomos en lugar de movimientos independientes de los átomos individuales. La mayoría de los átomos tienen los mismos vecinos en las dos fases y los movimientos netos son tales que en regiones suficientemente pequeñas un conjunto de celdas unitarias de la fase original es homogéneamente deformado en un

conjunto correspondiente de celdas unitarias de la nueva fase. Las regiones transformadas entonces cambian su forma. Regiones discretas de un sólido usualmente se transforman súbitamente con una muy alta velocidad que es casi independiente de la temperatura. En la mayoría de los casos la cantidad de transformación es característica de la temperatura y no incrementa con el tiempo. A estas transformaciones también se les llama transformaciones martensíticas o por corte.

La variedad de transformaciones de fase en los aceros se puede clasificar de acuerdo a bases termodinámicas, bases microestructurales y bases mecanísticas [1,37,38]:

- 1) La base termodinámica clasifica a la transformación de fase basada en las derivadas de la energía libre de Gibbs ( $G$ ) del sistema con el cambio de temperatura a presión constante. Si la primera derivada muestra una discontinuidad a una temperatura de transformación, la transformación es llamada de primer orden. Por ejemplo la transformación de un sólido a un líquido de un metal puro a la temperatura de fusión es una transformación de primer orden. Similarmente en otros sistemas, si se continúa diferenciando continuamente  $G$  y la discontinuidad aparece después de  $n$  diferenciaciones ( $d^n G/dT^n$ ), se le llamará transformación de  $n$ -orden.
- 2) La base microestructural relaciona la formación de una fase producto a partir de una fase madre (parent phase, en inglés). Si la fase producto se forma en cualquier parte dentro de una muestra sin la necesidad de nucleación, esta se clasifica como una transformación homogénea. Si la fase producto forma una pequeña entidad con una interfase aguda (sharp interface) y si crece dentro de la fase producto, es clasificada como una transformación heterogénea a través de un proceso de nucleación y crecimiento. La evolución microestructural en el acero es predominantemente una transformación heterogénea.
- 3) La base mecanística relaciona la forma en la que cambia la estructura del cristal durante la transformación. La transformación heterogénea en un material puede ocurrir mediante 3 mecanismos:

- Crecimiento atérmico a través de una interfase deslizante (glissile interface), como por ejemplo, la transformación de austenita a martensita.
- Crecimiento térmicamente activado (por ejemplo formación de perlita a partir de austenita).
- Crecimiento controlado por liberación o absorción de calor (por ejemplo la solidificación).

La Figura 19 muestra en forma más detallada cada subclasificación de los mecanismos de transformación de fases.

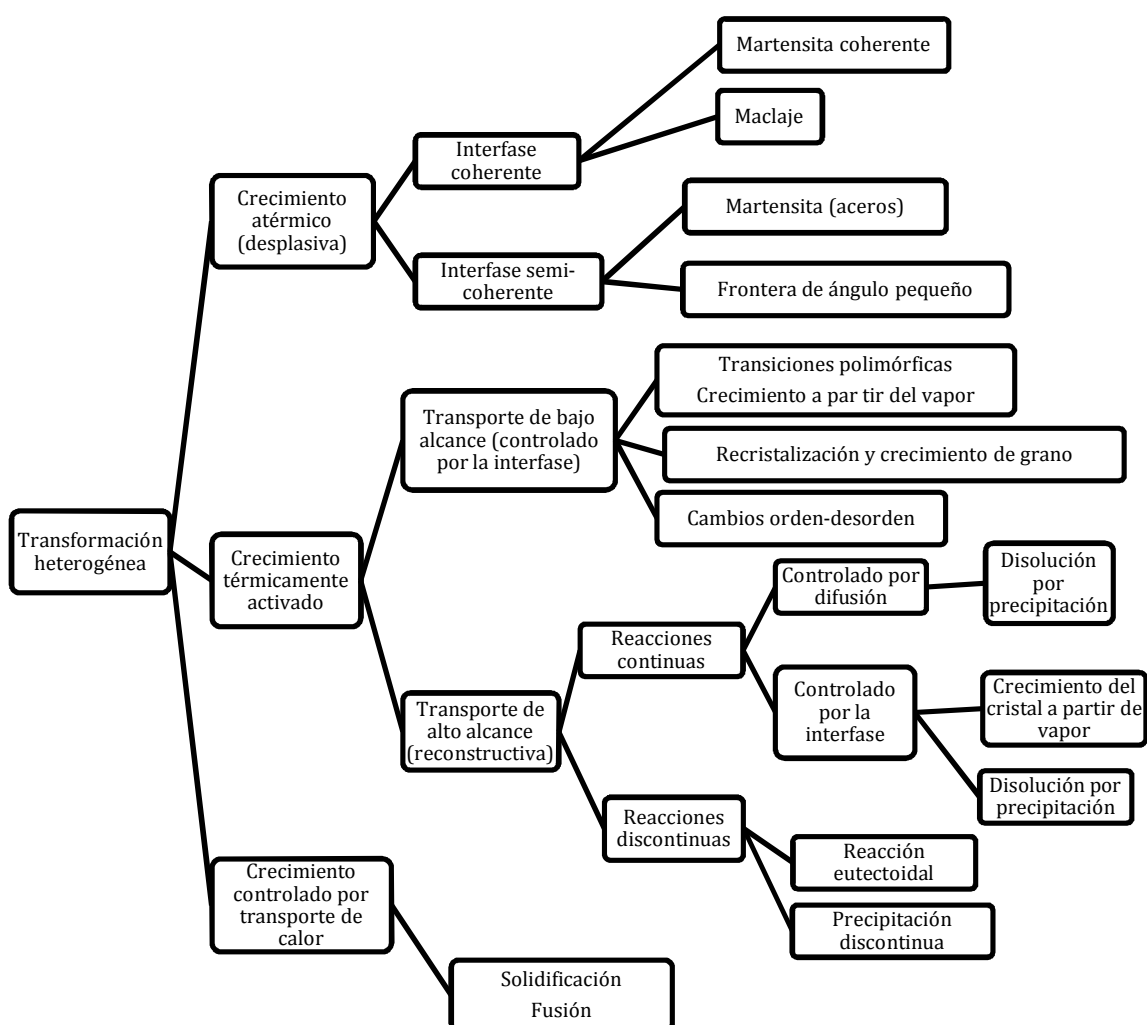


Figura 19.- Clasificación de las transformaciones heterogéneas basadas en los mecanismos de crecimiento [1,36].

La transformación puede ocurrir ya sea mediante el rompimiento de todos los enlaces y el rearreglo de los átomos a un patrón alternativo, ocurriendo normalmente este proceso por difusión. Este mecanismo produce una transformación reconstructiva. El otro mecanismo consiste en deformar en una forma homogénea el patrón original para producir una nueva estructura cristalina. La transformación es conocida como transformación por corte o por desplazamiento. Estos mecanismos se muestran en forma esquemática en la Figura 20.

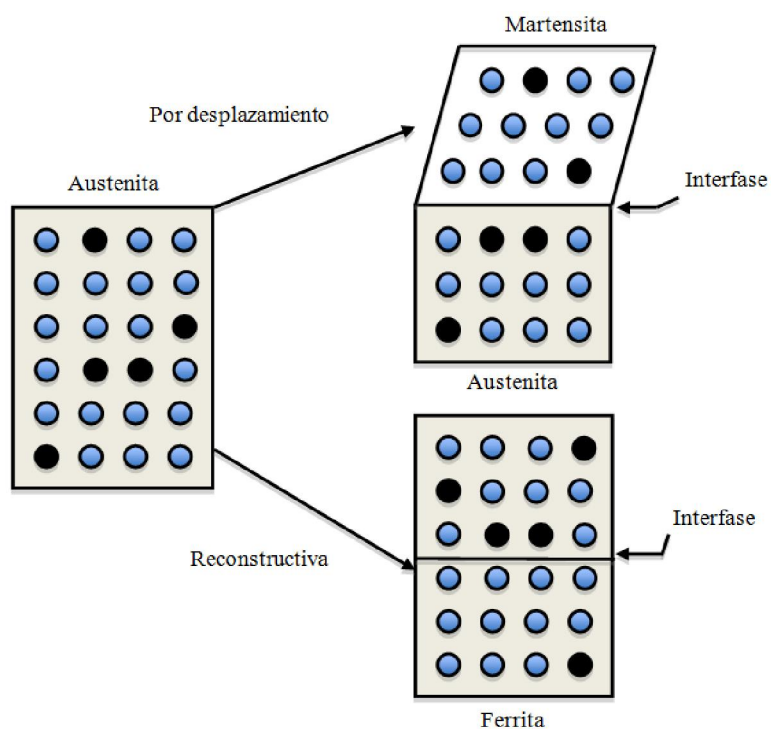


Figura 20.- Mecanismos de transformación [1,38].

En el mecanismo por desplazamiento, el cambio en la estructura del cristal también altera la forma macroscópica de la muestra cuando ésta no se encuentra restringida, la deformación de la forma durante la transformación restringida es compensada mediante una combinación de deformaciones elásticas y plásticas en la matriz circundante. La fase producto crece en la forma de placas delgadas para minimizar las deformaciones. Por lo tanto este tipo de transformación puede ocurrir a temperaturas donde la difusión no es posible durante la escala de tiempo del experimento.

La difusión de los átomos es la responsable que obtener una nueva estructura cristalina durante la transformación reconstructiva. El flujo de materia es suficiente para evitar a los componentes de corte de la deformación de la geometría, llevando solo a efectos de cambio de volumen.

## 4.2. Características de las transformaciones difusionales

La velocidad de transformación en las reacciones de nucleación y crecimiento puede ser dependiente de la rapidez a la cual los núcleos estables se forman y de su subsecuente rapidez de crecimiento. Las características generales de estas reacciones se pueden resumir de la siguiente manera [36]:

1. Dependencia con el tiempo: A cualquier temperatura, la cantidad de transformación incrementa con el tiempo hasta que se alcanza un estado de energía libre mínimo para el ensamble.
2. Dependencia con la temperatura: En un tiempo suficiente dado, la transformación en principio continuará hasta completarse. La cantidad de transformación no depende, por lo tanto, de la temperatura excepto en el sentido trivial de que el estado de equilibrio sea una función de la temperatura. Para las reacciones de rapidez y crecimiento, la rapidez de la reacción es cero a la temperatura termodinámica de transformación, dado que la energía requerida para la nucleación es infinita.
3. Irreversibilidad de la transformación: Dado que los átomos individuales se mueven independientemente, no hay una correlación entre las posiciones iniciales y finales de los átomos, después de retransformar a la fase original. Por ejemplo, si se convierte una fase  $\alpha$  a una fase  $\beta$  por calentamiento en un rango de transformación, y luego se reconvierte a  $\alpha$  por enfriamiento, el ensamble está termodinámicamente en su estado original. Sin embargo, usualmente los cristales de  $\alpha$  no estarán relacionados en tamaño, forma u orientación con los cristales  $\alpha$  original. La reacción es por lo tanto irreversible, no sólo termodinámicamente,

sino también en el sentido especial de que el ensamble nunca regresará a su configuración inicial.

4. Efecto de la deformación plástica: La nucleación puede ser más fácil en regiones plásticamente deformadas de la red del cristal dado que la fuerza motriz se incrementa y la barrera de energía libre disminuye. Otro factor es la energía de activación para la difusión atómica la cual puede ser igualmente disminuida en regiones de alta deformación. El proceso de deformación lleva a un gran incremento temporal en el número de vacancias y esto temporalmente incrementará la rapidez de difusión independientemente de la energía de activación. La deformación plástica a temperaturas donde los esfuerzos internos pueden ser removidos rápidamente mediante recuperación o recristalización, no afecta a la rapidez de transformación.
5. Composición, volumen atómico y forma de la nueva fase: La composición y el volumen atómico de los productos de la reacción no necesariamente deben estar relacionados a aquellos de la fase original. En las transformaciones de nucleación y crecimiento la forma de las partículas de la nueva fase cuando la transformación está incompleta varía considerablemente. Si las energías superficiales son importantes, la forma será esférica para energía superficial isotrópica y aproximadamente poliedros equiaxiales para energías anisotrópicas. Sin embargo, si hay un cambio de volumen la energía de deformación en un ensamble condensado será a menudo más importante que las energías superficiales. Los cristales de la nueva fase estarán en forma de placas o agujas orientadas con respecto a la red original de tal forma que el mejor ajuste atómico se obtiene a través de la interfase. La estructura resultante es llamada estructura Widmånstatten.
6. Relación de orientación: En algunas transformaciones de nucleación y crecimiento en el estado sólido no hay relación entre las orientaciones de las 2 redes. Cuando las estructuras Widmånstatten son producidas o en las etapas iniciales del crecimiento coherente de los precipitados a partir de la solución sólida se ha encontrado que una red tiene una orientación fija relativa a la otra.

Las relaciones de orientación son comúnmente encontradas cuando 2 fases se forman juntas como en la solidificación de una reacción eutéctica o una reacción eutectoide en el estado sólido.

### 4.3. Características de las transformaciones sin difusión

En una reacción martensítica ocurre un movimiento cooperativo de muchos miles de átomos con una velocidad que se aproxima a las ondas del sonido en el cristal. La reacción comienza espontáneamente a alguna temperatura y la fase madre es mecánicamente inestable. Las características generales de estas reacciones se pueden resumir de la siguiente manera [36]:

1. Dependencia en el tiempo: La cantidad de transformación es virtualmente independiente del tiempo. A una temperatura constante una fracción de la fase original se transforma muy rápidamente después de la cual ya no hay más cambio.
2. Dependencia en temperatura: La cantidad de transformación es característica de la temperatura asumiendo que otras variables como el tamaño de grano se mantienen constantes. La transformación en el enfriamiento ocurre espontáneamente a una temperatura fija  $M_s$  y conforme se cambia la temperatura más material se transforma hasta que se alcanza una temperatura  $M_f$  en la cual el cambio es completo.
3. Reversibilidad de la transformación: Las reacciones martensíticas son reversibles en el sentido de que una configuración atómica inicial puede ser obtenida repetidamente. La reversibilidad está asociada con una histéresis de temperatura y la reacción inversa comienza a una temperatura arriba de  $M_s$ .
4. Efecto del esfuerzo aplicado: La deformación plástica es mucho más importante en las reacciones martensíticas que en las de nucleación y crecimiento. La aplicación de esfuerzos plásticos a cualquier temperatura en el rango de transformación usualmente incrementa la cantidad de transformación, y la

reacción puede ser completada por este medio. La temperatura más alta a la cual se puede formar martensita bajo condiciones de esfuerzo es llamada  $M_d$ .

5. Composición, volumen atómico y forma de la nueva fase: En una reacción martensítica cada cristal se transforma en nuevos cristales de la misma composición química. Las placas o bandas están orientadas con respecto a la red original.
6. Relaciones de orientación: En los cambios martensíticos siempre hay una relación definida entre la orientación de la estructura original y la de la nueva fase.
7. Estabilización: Si el espécimen se enfría a una temperatura en el rango de transformación, se mantiene por un periodo de tiempo, y se enfría de nuevo, la transformación no comenzará inmediatamente. En todas las temperaturas subsecuentes la cantidad de transformación es menor que aquella producida por enfriamiento directo a la temperatura mencionada. Este fenómeno es conocido como estabilización. El grado de estabilización incrementa con el tiempo para el cual el espécimen se mantiene a esa temperatura.

#### 4.4. Transformaciones de fase en aceros eléctricos

Cuando el contenido de silicio en el hierro puro excede aproximadamente 2.5%, la transformación alotrópica del hierro de la fase de ferrita  $\alpha$ , a austenita  $\gamma$ , se suprime, ver Figura 3. La ausencia de esta transformación permite que una aleación de acero con un contenido mayor de silicio sea totalmente ferrítica hasta el punto de fusión. Esto permite que el fabricante de productos planos pueda aplicar técnicas de laminación en frío y de tratamientos térmicos para promover una recristalización secundaria la cual ayuda a mejorar la textura cristalográfica. La Figura 21 muestra el contenido de austenita presente con el contenido de carbono para una aleación con 2.5% Si.



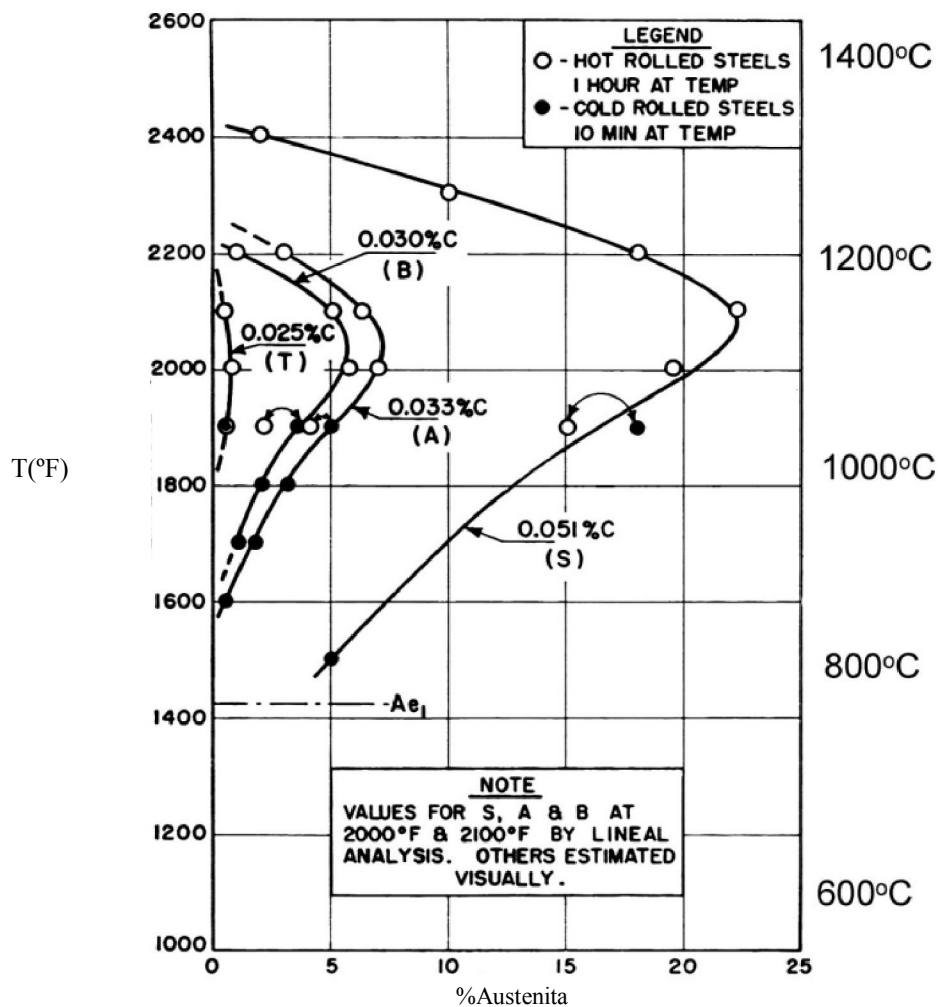


Figura 21.- Cantidad de austenita presente en aleaciones Fe-Si a altas temperaturas [5].

# CAPÍTULO 5

## EVOLUCIÓN MICROESTRUCTURAL

### 5.1. Introducción

La energía libre de un material cristalino se eleva durante la deformación mediante la interacción de los defectos cristalinos. Cualquier material que contenga estos defectos será termodinámicamente inestable. Sin embargo, la desaparición espontánea de estos defectos se realiza a una rapidez muy lenta a ciertas temperaturas lo que provocará que se mantengan dichos defectos después de la deformación. Si el material es subsecuentemente calentado a una alta temperatura (proceso conocido como recocido), habrá procesos térmicamente activados que ayudarán a la remoción o a un rearrreglo de dichos defectos en configuraciones de más baja energía. Existen procesos conocidos como recuperación, recristalización y crecimiento de grano.

## 5.2. Deformación plástica

La deformación resulta en un incremento en la densidad de dislocaciones y dado que algunos cristales se deforman más que otros existirán gradientes intergranulares en la densidad de dislocaciones. Sin embargo, la deformación también da origen a varios cambios intragranulares. Estos incluyen formación de celdas que pueden ser divididas mediante paredes de dislocación densas las cuales al incrementar su espesor se convierten a bandas intragranulares (o bandas de transición) que separan regiones con altos grados de desorientación, como se muestra en la Figura 22.

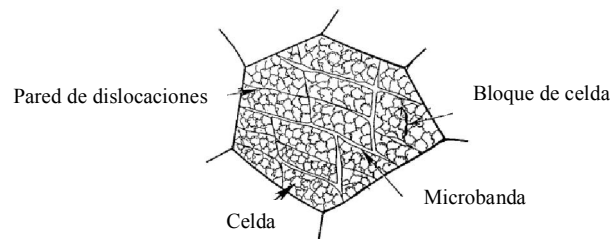


Figura 22.- Subdivisión granular durante pequeñas deformaciones [35].

Estas subdivisiones del grano implican que existe una deformación intragranular, y por lo tanto, gradientes de orientación. Dado que la deformación depende de la orientación, la energía almacenada en el material (como resultado de la deformación) varía espacialmente de un grano a otro. Suponiendo una elasticidad isotrópica, la energía almacenada por unidad de volumen está dada como:

$$E_{almacenada} \approx 0.5\rho Gb^2 \quad (5.1)$$

Donde  $\rho$  es la densidad de dislocaciones,  $G$  es el módulo de corte del material y  $b$  es la magnitud del vector de Burgers.

Se pueden aplicar una gran variedad de tratamientos térmicos al acero. Algunos se pueden utilizar para suavizar el acero entre las partes secuenciales de un laminado en

frío, para producir la homogeneización de los elementos o compuestos disueltos, o para promover un crecimiento de grano. Los granos pueden crecer durante el cambio de fase, por lo que se necesita de un manejo cuidadoso del tratamiento térmico para optimizar la forma y el tamaño del grano.

### 5.3. Recuperación

El término recuperación se refiere a los cambios en un material deformado que ocurren previos a la recrystalización, los cuales restauran parcialmente las propiedades mecánicas a sus valores antes de la deformación. La recuperación resulta en la reducción de la densidad de dislocaciones intragranulares a través de un subproceso referido como poligonización. Este proceso es energéticamente favorable dado que la energía de deformación total en el material disminuye cuando las dislocaciones se arreglan así mismas en fronteras de ángulo pequeño. Estas fronteras separan partes de la microestructura donde las diferencias de orientación son menores a  $5^\circ$ . La Figura 23 muestra un ejemplo de poligonización.

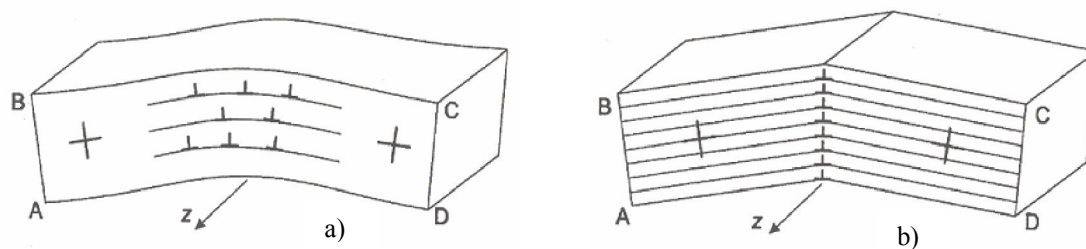


Figura 23.- Configuraciones de dislocación posibles: a) Arreglo aleatorio de dislocaciones en un cristal flexionado y b) Dislocaciones rearrregladas para formar una frontera de grano [35].

La Figura 24 muestra una serie de eventos que ocurren durante la recuperación de un material deformado plásticamente. Inicialmente se tiene la generación de dislocaciones (maraña de dislocaciones) generadas debido al proceso de deformación plástica, posteriormente se inicia el proceso de formación de celdas en las cuales se da

inicio al rearrreglo y aniquilación de dislocaciones para formar consecuentemente las fronteras de grano.

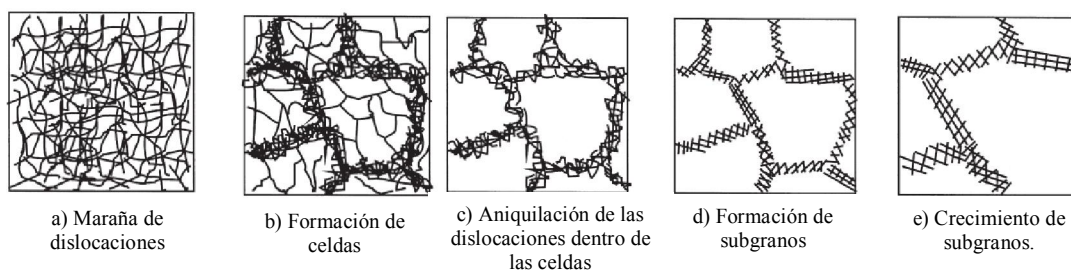


Figura 24.- Etapas en la recuperación de un material deformado plásticamente [39].

Los cambios microestructurales que ocurren durante la recuperación afectan a las propiedades mecánicas, y por lo tanto la recuperación se mide a menudo mediante cambios en el esfuerzo de cedencia o en la dureza del material [39].

La posibilidad de que ocurran procesos de difusión y autodifusión a altas temperaturas asegura que ocurran procesos de recuperación tan pronto como aparecen las dislocaciones durante la deformación plástica. Una vez que se establece la recuperación se puede contrarrestar el efecto de endurecimiento por deformación y la curva esfuerzo-deformación verdadera llega a ser horizontal, como se muestra en la Figura 25.

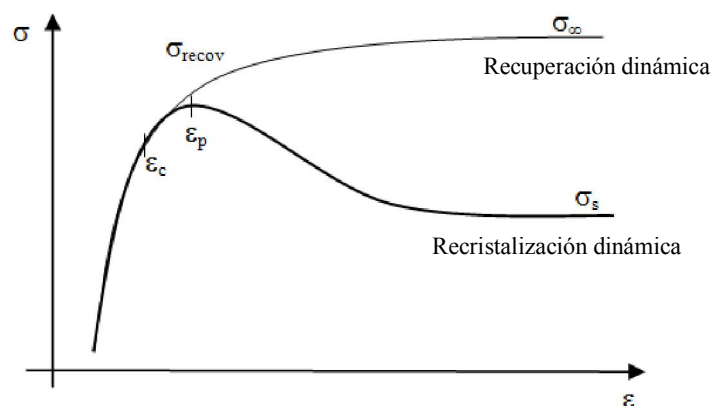


Figura 25.- Curvas esfuerzo-deformación verdadera mostrando la recuperación dinámica y la recristalización dinámica.

La curva de recuperación dinámica puede describirse mediante la siguiente relación [40]:

$$\sigma = \left[ \sigma_{\infty}^2 - (\sigma_{\infty}^2 - \sigma_e^2) \exp(-r\varepsilon) \right]^{1/2} \quad (5.2)$$

en donde  $\sigma_e$  es el esfuerzo de cedencia,  $\sigma_{\infty}$  es la saturación del esfuerzo en la recuperación y  $r$  es un parámetro de recuperación. De la Figura 25, se puede observar que la curva de fluencia exhibe una etapa inicial de endurecimiento por deformación seguido de un esfuerzo de fluencia que se hace estable (constante). La magnitud de este esfuerzo ( $\sigma_{\infty}$ ) disminuye al incrementar la temperatura, y al disminuir la velocidad de deformación de acuerdo a la siguiente relación [41,42]:

$$Z = \dot{\varepsilon} \exp\left(\frac{Q}{RT}\right) = C' [\sinh(\alpha' \sigma_{\infty})]^{n_{rd}} \quad (5.3)$$

en donde  $Z$  es el parámetro de Zener-Hollomon y  $Q$  es la energía de activación para la deformación,  $R$  es la constante de los gases,  $C'$  y  $\alpha'$  son constantes. El valor  $n_{rd}$  es un exponente del esfuerzo. Se han reportado valores de  $Q$  con un valor de 315 KJ/mol para un acero eléctrico con 3.16% de silicio [5].

El tipo de recristalización exhibida por un material específico está relacionado por su energía de falla de apilamiento (EFA) [39,41]. En materiales con alta EFA la recuperación dinámica ocurre fácilmente debido a que las dislocaciones no se disocian y por lo tanto pueden desplazarse a otros planos para combinarse unas con otras fácilmente, lo que permite la aniquilación de dislocaciones de signos opuestos limitando por lo tanto el incremento de energía almacenada. Con los metales en los que la recuperación no es muy eficiente (tienen poca EFA), la generación de dislocaciones puede llevar a la nucleación y crecimiento de granos recristalizados durante la deformación. Esto producirá una caída en la curva esfuerzo-deformación que se puede calcular como [43]:

$$\Delta\sigma = (\sigma_{\infty} - \sigma'_{\infty}) \left\{ 1 - \exp \left[ -k' \left( \frac{\varepsilon - \varepsilon_c}{\varepsilon_p} \right)^{m'} \right] \right\} \quad \text{para } \varepsilon > \varepsilon_c \quad (5.4)$$

$$\Delta\sigma = 0 \quad \text{para } \varepsilon < \varepsilon_c \quad (5.5)$$

en donde  $\varepsilon_c$  es una deformación crítica y  $\varepsilon_p$  (peak strain) indica la deformación correspondiente al máximo esfuerzo de fluencia obtenida como [42,43]:

$$\varepsilon_p = Ad_o^p Z^q \quad (5.6)$$

donde  $d_o$  es el tamaño de grano previo a la deformación y  $A$ ,  $p$  y  $q$  son parámetros que dependen del tipo de material analizado.

## 5.4. Recristalización

La formación de nuevos granos libres de deformación a partir de materiales deformados es llamada recristalización [35,39]. La recristalización ocurre mediante una nucleación de granos libres de deformación y su crecimiento en la cual se consume a la microestructura deformada. La recristalización difiere de la recuperación por el hecho de que el incremento en el tamaño de los granos libres de deformación se facilita por el movimiento de fronteras de ángulo grande. Estas fronteras de ángulo grande actúan como fuentes de dislocaciones conforme migran a través del material resultando simultáneamente en el consumo de la matriz deformada y el crecimiento en la densidad de dislocaciones del material.

Como se mencionó anteriormente, la deformación plástica de materiales induce dislocaciones, lo cual incrementa la energía libre y lleva el material a un estado el cual no es termodinámicamente estable. La fuerza motriz para la formación de granos libres de deformación es la disminución de la energía libre de los materiales. La disminución

de la energía libre debido al movimiento en una distancia  $dx$  de un segmento de frontera de grano con área superficial  $dS$  se expresa como:

$$dG = p dS dx \quad (5.7)$$

De la ecuación anterior:

$$p = dG/dV \quad (5.8)$$

donde  $dV$  es el volumen barrido por el segmento superficial. Por lo tanto  $p$  se refiere como la fuerza motriz de la frontera de grano por unidad de área.

Existen varios tipos de recristalización: estática, dinámica y metadinámica. La recristalización dinámica ocurre durante la deformación mientras que la recristalización estática ocurre después de la deformación durante un recocido subsecuente [39,40].

Cuando la deformación crítica para recristalización dinámica se excede, habrá núcleos presentes de recristalización en el material. Si se detiene la deformación, pero el material se mantiene a alta temperatura, estos núcleos crecerán sin un periodo de incubación en la matriz heterogénea parcialmente recristalizada, y el fenómeno es conocido como recristalización metadinámica [39]. La formación de granos libres de deformación puede ocurrir de forma continua o discontinua.

Cuando la recuperación dinámica es muy eficiente, los granos iniciales pueden someterse a deformaciones grandes sin perder sus indentidades. En la ausencia de un mecanismo de nucleación, la nueva estructura granular resulta en una fragmentación progresiva de ésta mediante la poligonización y su evolución en fronteras de ángulo grande. Este mecanismo es conocido como recristalización dinámica continua. La recristalización discontinua ocurre a través de una nucleación y crecimiento de los núcleos donde la densidad de dislocaciones de la matriz deformada desaparece gradualmente debido a un crecimiento dependiente del tiempo de los núcleos moviendo rápidamente fronteras de grano de ángulo grande.



Un material deformado, por ejemplo una hoja laminada, puede suavizarse mediante una recristalización durante un tratamiento de recocido. Su microestructura recristalizada estará definida principalmente por la distribución de sus diámetros de grano (distribución de tamaños de grano) y la distribución de sus orientaciones cristalográficas (textura).

El desarrollo de la textura por recristalización durante el recocido depende fuertemente de muchos factores tales como: la microestructura inicial durante la deformación, el porcentaje de deformación, la composición química del material y el tipo de proceso de recocido [39].

El desarrollo de la microestructura durante la recristalización depende de 2 factores: la cinética de nucleación y la cinética de crecimiento de los núcleos. El crecimiento de los núcleos durante la recristalización se acepta como un producto de la movilidad de la frontera de grano y la presión para la recristalización se origina a partir de la alta densidad de dislocación de la estructura deformada. La curvatura de los núcleos que crecen puede retardar el movimiento del frente de recristalización pero se ha encontrado que el efecto es muy pequeño [35]. El crecimiento o velocidad del frente de recristalización depende no sólo de la fuerza motriz ( $p$ ) sino también de la movilidad ( $m$ ) de la frontera de grano a través del frente de recristalización, ecuaciones (5.9) y (5.10) [40,41,44,45].

$$v = mp \quad (5.9)$$

$$m = m_o \exp\left(-\frac{Q_b}{RT}\right) \quad (5.10)$$

La teoría del crecimiento orientado se basa en la observación de que algunas fronteras de grano se mueven más rápido que otras y las orientaciones asociadas con esas fronteras consumen la microestructura de deformación durante la recristalización.

Ha habido muchos intentos para describir la recrystalización, en particular su cinética, el tamaño de grano recrystalizado y la textura de recrystalización. La cinética de recrystalización homogénea fue primero modelada siguiendo el modelo de Johnson, Mehl, Avrami y Kolmogorov (JMAK) [36,40], en el que se considera la nucleación y crecimiento de granos esféricos y resolvieron el problema particular de choque de granos, lo cual termina localmente el crecimiento de los núcleos de recrystalización.

La recrystalización requiere que se lleven a cabo las siguientes consideraciones [40]:

1. Se requiere una cantidad mínima de deformación para iniciar la recrystalización. Esto ayuda a establecer una densidad de dislocaciones mínima para poder crear un núcleo.
2. Mientras la deformación sea mayor, se requiere una menor temperatura para iniciar al a recrystalización.
3. Incrementando la temperatura del tratamiento de recocido disminuye la temperatura de iniciación.
4. El tamaño final de grano disminuye con la cantidad de deformación e incrementa con la temperatura de deformación.
5. Se requiere mayor deformación, a una temperatura y tiempos dados, cuando el tamaño de grano original es más grande.
6. Se requiere una mayor deformación para producir una cantidad específica de endurecimiento al incrementar la temperatura de trabajo.

El tratamiento analítico de la cinética de recrystalización con la teoría JMAK tiene las siguientes suposiciones [36,40,46]:

1. La nucleación ocurrió estadísticamente sin preferencia de sitios (distribución aleatoria de núcleos).
2. La velocidad de crecimiento,  $v$  y el número de núcleos  $N$ , permanecen constantes.
3. Los núcleos pueden crecer isotrópicamente en tres dimensiones (poliedro), dos dimensiones (plaquetas) o en una dimensión (crecimiento lineal).
4. El crecimiento cesa después del choque.

#### 5.4.1. Recristalización estática (SRX)

La cinética de recristalización, es decir, la variación de la fracción volumétrica recristalizada con el tiempo  $X(t)$  se calcula de acuerdo a JMAK en base a 2 fenómenos: nucleación y crecimiento de acuerdo con las siguientes ecuaciones:

$$N = \frac{dn}{dt} \frac{1}{(1-X)} \quad (5.11)$$

donde  $N$  es el número de núcleos  $dn$  por unidad de volumen generados por intervalo de tiempo  $dt$  dentro del volumen sin recristalizar  $(1-X)$ .

$$v = \frac{dR}{dt} \quad (5.12)$$

$v$ : velocidad de migración de la frontera de grano, es decir, el desplazamiento  $dR$  de una frontera de grano paralelo a su dirección normal por intervalo de tiempo  $dt$ .

Suponiendo una nucleación constante con el tiempo, en el tiempo  $t > 0$ , un núcleo producido en el tiempo  $\tau < t$ , tiene el volumen ( $V'_N$ ) se obtiene:

$$V'_N = \frac{4}{3} \pi [(t-\tau)v]^3 \quad (5.13)$$

Y crece en el intervalo  $(t, t+dt)$ :

$$dV'_N = 4\pi (t-\tau)^2 v^3 dt \quad (5.14)$$

Debido al choque el decremento del volumen sin recristalizar en el intervalo de tiempo considerado está dado por:

$$dV_N(t) = [1-X(t)] dV'_N(t) = 4\pi v^3 (t-\tau)^2 [1-X(t)] dt \quad (5.15)$$

El número de núcleos generados en  $\tau$ , es decir, en el intervalo  $(\tau, \tau+d\tau)$  es  $N(\tau)d\tau$ . Por lo tanto, el incremento de la fracción volumétrica recristalizada en el intervalo de tiempo  $(t, t+dt)$  debido a la generación de núcleos en  $(\tau, \tau+d\tau)$  con  $\tau < t$  se obtiene con la ecuación (5.16):

$$dX_{\tau} = 4\pi v^3 (t-\tau)^2 [1-X(t)] dt N(\tau) d\tau \quad (5.16)$$

El incremento total de la fracción volumétrica recristalizada en  $(t, t+dt)$  está dada por la suma de todos los núcleos producidos en todos los tiempos  $\tau < t$ :

$$dX(t) = \int_0^t dX_{\tau} d\tau = 4\pi v^3 t^2 N [1-X(t)] dt \quad (5.17)$$

con  $N$  siendo constante. Finalmente la fracción volumétrica recristalizada en el tiempo  $t$  está dada por la sumatoria en todos los incrementos  $dX$  hasta el tiempo  $t$ :

$$X(t) = \int_0^t dX(t') dt' = 1 - \exp\left(-\frac{\pi}{3} N v^3 t^4\right) \quad (5.18)$$

En términos generales la ecuación JMAK queda:

$$X = 1 - \exp(-kt^n) = 1 - \exp\left(-k' \left(\frac{t}{t_R}\right)^n\right) \quad (5.19)$$

donde  $t_R$  es un tiempo característico para la recristalización,  $k=k'/t_R^n$  es la constante de Avrami, mientras que  $k'$  es un coeficiente que depende de la definición de  $t_R$  y  $n$  es el exponente de Avrami. Para una velocidad de nucleación constante  $n=4$ , pero experimentalmente  $1 < n < 3$  [36].

Hay un problema con este modelo, en realidad no hay una nucleación homogénea ni una velocidad de crecimiento que sea constante espacial y temporalmente, la nucleación es heterogénea ya que esta se origina principalmente en zonas específicas, por ejemplo, fronteras de grano [46].

En el caso general:

$$k' = -\ln(1-f) \quad (5.20)$$

donde  $f$  es una fracción de recristalización seleccionada. Si los tiempos asociados con 5, 50 y 95% de recristalización son de interés, entonces  $k'$  sería 0.05, 0.69 y 2.99 respectivamente. Típicamente se utiliza  $t_{50\%}$  ó  $t_{50}$  [40] lo cual lleva a la ecuación (5.21):

$$X = 1 - \exp \left[ -0.69 \left( \frac{t}{t_{50}} \right)^n \right] \quad (5.21)$$

Considerando la mitad de la recristalización de la ecuación (5.18), entonces resulta:

$$\exp \left( -\frac{\pi N v^3 t_{50}^4}{3} \right) = 0.5 \quad (5.22)$$

y despejando  $t_{50}$  se obtiene:

$$t_{50} = \left( \frac{0.69}{k} \right)^{\frac{1}{4}} = \frac{0.9}{N^{1/4} v^{3/4}} \quad (5.23)$$

De esta relación se observa que altas velocidades de nucleación y crecimiento provocan una recristalización rápida. Tanto la movilidad de la frontera de grano como la velocidad de nucleación son procesos térmicamente activados, por lo tanto se pueden asociar energías de activación  $Q_N$  y  $Q_v$ , respectivamente y se pueden expresar de la siguiente manera [39]:

$$v = v_o \exp \left( \frac{-Q_v}{kT} \right) \quad (5.24)$$

$$N = N_o \exp \left( \frac{-Q_N}{kT} \right) \quad (5.25)$$

De estas relaciones se puede reescribir la ecuación (5.23) como:

$$t_{50} = \left[ \frac{0.9}{(N_o v_o^3)^{1/4}} \right] \exp\left(\frac{Q_N + 3Q_v}{4kT}\right) \quad (5.26)$$

De la ecuación anterior, la energía aparente de recristalización, estaría definida por:

$$Q_{aparente} = \frac{Q_N + 3Q_v}{4} \quad (5.27)$$

El desarrollo del diámetro del grano recristalizado ( $d$ ) se puede evaluar a partir del método JMAK, dado que:

$$d \approx 2v\tau_{50} \quad (5.28)$$

Sustituyendo la ecuaciones (5.23) a la (5.25) se obtiene:

$$d = 1.8 \left( \frac{v_o}{N_o} \right)^{1/4} \exp\left[\frac{Q_N - Q_v}{4kT}\right] \quad (5.29)$$

De la ecuación anterior se observa que el tamaño de grano final se determina mediante una competencia entre la velocidad de nucleación y la de crecimiento, donde velocidades de nucleación más altas llevan a un tamaño de grano más fino, mientras que velocidades de crecimiento altas llevan a tamaños más grandes. Estas ecuaciones solo aplicarán al análisis de recristalización estática y a la recristalización dinámica discontinua que son procesos que involucran nucleación y crecimiento.

La deformación y la velocidad de deformación también son parámetros que afectan al valor  $t_{50}$ , y Sellars propuso la siguiente ecuación [39,47]:

$$t_{50} = A\epsilon^{-p} \dot{\epsilon}^{-q} d^r \exp(Q_{SRX} / RT) \quad (5.30)$$

La Tabla 5.1 muestra una recopilación de modelos empíricos que describen la cinética de recristalización estática para una variedad de aceros.

Tabla 5.1 Modelos empíricos que describen la cinética de la recristalización estática [48].

Composición química	Forma general $t_{50} = A\varepsilon^{-p}\dot{\varepsilon}^{-q}d_o^r \exp(Q_{SRX} / RT)$	(5.30)
C-Mn	$t_{50} = 5 \times 10^{-21} \varepsilon^{-4} d_o^2 \exp\left(\frac{Q}{RT}\right)$	(5.31)
C-Mn-Nb	$t_{50} = 1.9 \times 10^{-18} \varepsilon^{-2.8} \dot{\varepsilon}^{-0.41} d_o^2 \exp\left(\frac{324000}{RT}\right)$	(5.32)
C-Mn-V	$t_{50} = 4.29 \times 10^{-15} \varepsilon^2 \dot{\varepsilon}^{-1/3} d_o \exp\left(\frac{262000}{RT}\right)$	(5.33)
C-Mn-Nb-Ti	$t_{50} = 7.25 \times 10^{-18} \varepsilon^{2.8} \dot{\varepsilon}^{-1/3} d_o \exp\left(\frac{349000}{RT}\right)$	(5.34)
C-Mn-Nb-Ti-Mo	$t_{50} = 6 \times 10^{-17} \varepsilon^{-3.1} \dot{\varepsilon}^{-0.43} d_o^2 \exp\left(\frac{280000}{RT}\right)$	(5.35)
C-Mn-Nb-Ti-0.2Ni	$t_{50} = 3.3 \times 10^{-16} \varepsilon^{-3.1} \dot{\varepsilon}^{-0.43} d_o^2 \exp\left(\frac{261000}{RT}\right)$	(5.36)

Para el caso de la recristalización metadinámica, su comportamiento está regido por el crecimiento de los granos que nuclearon durante la deformación previa (y parcialmente por la nucleación de nuevos granos en las regiones endurecidas por deformación, es decir, por recristalización estática). Por esta razón la energía de activación para la recristalización metadinámica sería aproximadamente  $3Q_v/4$  y siempre es menor que la de la recristalización estática.

#### 5.4.2. Recristalización dinámica (DRX)

La recristalización dinámica es una función de la deformación, velocidad de deformación, temperatura, y tamaño inicial del grano, los cuales cambian con el tiempo.

También es posible describir la cinética de la recrystalización dinámica con la ayuda de la ecuación de Avrami. La variable de tiempo que se aplica en condiciones estáticas puede reemplazarse con la relación:

$$\varepsilon = \dot{\varepsilon} t \quad (5.37)$$

La recrystalización dinámica iniciará al sobrepasar una deformación crítica  $\varepsilon_c$ , de lo contrario habrá recuperación dinámica [39]. De acuerdo a observaciones metalográficas generalmente la deformación crítica se toma como  $5/6\varepsilon_p$  [40].

La recrystalización dinámica se puede obtener utilizando una relación de Avrami de la siguiente manera [40,42,49]:

$$X_D = 1 - \exp \left[ -k \left( \frac{\varepsilon - \varepsilon_c}{\varepsilon_p} \right)^n \right] \quad (5.38)$$

De donde  $X_D$  representa la fracción dinámica recrystalizada,  $\varepsilon$  es la deformación verdadera y  $k$  y  $n$  son constantes.

## 5.5. Crecimiento normal y anormal de grano

El crecimiento normal de grano se da mediante la reducción del área de la frontera de grano la cual subsecuentemente resulta en una disminución de la energía interna del material. La migración de la frontera que resulta en un crecimiento de grano se considera que ocurre mediante una serie de saltos atómicos de un cristal a su cristal vecino que se originan debido a una diferencia en las energías libres de los 2 granos (difusión en estado sólido entre 2 granos adyacentes).

La Figura 26a) muestra una ilustración esquemática de la migración de la frontera. Si saltan más átomos del grano 1 al grano 2, entonces el grano 1 se encogerá y la frontera



se moverá hacia la izquierda, esto es, se moverá de manera opuesta a la dirección del flujo de átomos. La Figura 26b) muestra la diferencia en las energías libres de los 2 cristales.

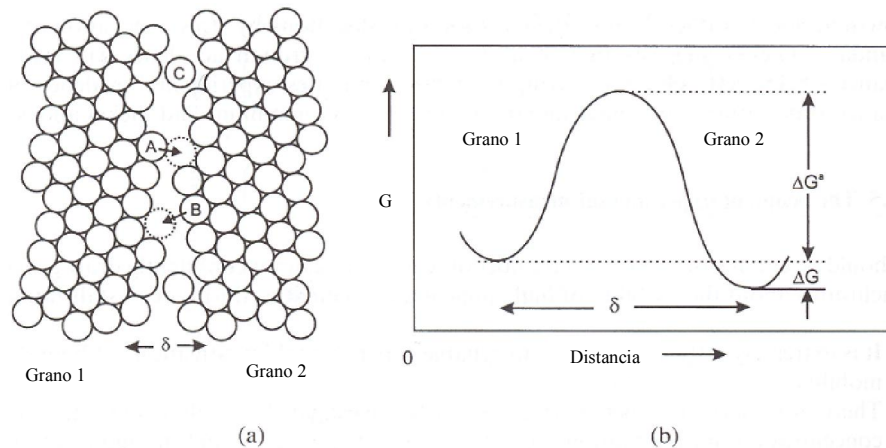


Figura 26. a) Ilustración esquemática de la migración de la frontera, b) Barrera energética entre granos 1 y 2, [35].

El crecimiento anormal de grano se describe como un proceso discontinuo [34]. A veces se le llama una recristalización secundaria [35,39]. Unos pocos granos en la microestructura crecen y consumen la matriz de granos más pequeños y se desarrolla una distribución bimodal de tamaños de grano. Eventualmente, estos granos grandes chocan y entonces el crecimiento normal de grano continúa. El crecimiento anormal de grano es un método importante para producir materiales con granos grandes y también contribuye al procesamiento de aleaciones Fe-Si.

La energía de activación del crecimiento anormal de grano consiste en la reducción en la energía en la frontera de grano como sucede con el crecimiento normal de grano, sin embargo, en materiales delgados se origina una fuerza motriz a partir de la dependencia de la energía superficial con la orientación. El crecimiento anormal de grano se origina mediante un crecimiento preferencial de unos pocos granos que tienen una ventaja especial de crecimiento sobre sus vecinos.

Los posibles factores que pueden contribuir a este crecimiento anormal son la deformación, diferencias en la energía superficial, la presencia de inclusiones, precipitados y solutos y la distribución de las interfases en los materiales [35].

Como se muestra en la Figura 27, después de que la matriz ha sido consumida completamente y que la fuerza motriz para la recuperación y recristalización ha sido consumida, el crecimiento de grano procede mediante una reducción de la energía libre interfacial en exceso disminuyendo el área total de la frontera de grano presente en el material. La Figura 27 ilustra que la recuperación no cambia el tamaño o formas de los cristales pero decremanta su contenido de dislocaciones internas [39].

En las Figuras 27c) y 27d) la recristalización involucra la formación de nuevos granos libres de deformación que han nucleado a lo largo de las fronteras de grano. Consistente con el crecimiento, el tamaño de grano ha incrementado en las Figuras 27e) y 27f) acompañado por una reducción en el área interfacial total.

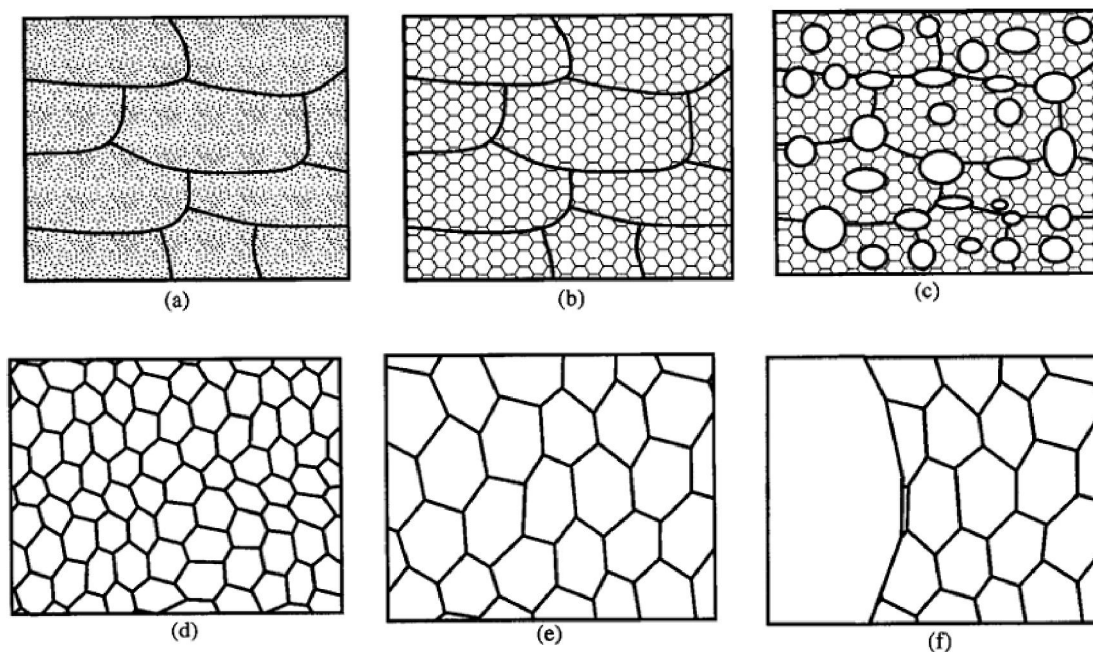


Figura 27.- Etapas de la evolución microestructural de un metal: a) Material deformado, b) Después de la recuperación, c) Después de una recristalización parcial, d) Completamente recristalizado, e) Con crecimiento de grano y f) Con crecimiento anormal de grano, [39].

Considerando el crecimiento de grano como un proceso difusional, recordando la primera ley de Fick:

$$J = -D \frac{d\mu}{dx} \quad (5.39)$$

cada flujo neto,  $J$ , se puede aproximar a una función exponencial de la energía requerida para el movimiento atómico. El flujo neto ( $J$ ) del grano 1 al grano 2 (ver Figura 25) está determinado por la ecuación (5.40) [50]:

$$J = c_{12} \exp\left(-\frac{\Delta E_{12}}{kT}\right) - c_{21} \exp\left(-\frac{\Delta E_{21}}{kT}\right) \quad (5.40)$$

donde  $c_{ij}$  es una constante positiva,  $T$  es la temperatura,  $k$  es la constante de Boltzmann y  $\Delta E_{ij}$  es la energía de activación requerida para el flujo del grano 1 al grano 2. La velocidad normal de la interfase  $v$  está dada por el producto del flujo neto difusivo y el volumen atómico  $N_a/V_m$  resultando en:

$$v = m \frac{\Delta E}{\Delta V_m} \quad (5.41)$$

donde la movilidad  $m$  de la interfase se introduce como la proporcionalidad entre la fuerza motriz para el movimiento de la frontera  $\Delta E/\Delta V$  y la velocidad de la interfase, ver ecuación (5.9).

Burke y Turnbull [50] definieron una velocidad de migración de la frontera,  $G$ , para el crecimiento normal de grano durante un tratamiento isotérmico como:

$$G = \frac{K' \sigma V}{r} \quad (5.42)$$

$K'$  es una constante de rapidez,  $\sigma$  es la energía superficial de la frontera,  $V$  el volumen atómico y  $r$  el radio de curvatura de la frontera. La constante de rapidez  $K'$  se define con una relación tipo Arrhenius como:

$$K' = K'_o \exp\left(-\frac{Q_G}{RT}\right) \quad (5.43)$$

en donde  $K'_o$  es un factor pre-exponencial,  $Q_G$  es la energía de activación para el crecimiento de grano,  $R$  es la constante universal de los gases y  $T$  la temperatura absoluta.

Suponiendo una proporcionalidad entre el radio de curvatura ( $r$ ) de la frontera y el tamaño de grano promedio  $\bar{D}$  se obtiene:

$$r \propto \bar{D} \quad (5.44)$$

Y con una proporcionalidad entre  $\bar{D}$  y  $G$ :

$$\frac{d\bar{D}}{dt} \propto G \quad (5.45)$$

Se obtiene:

$$\frac{d\bar{D}}{dt} = \frac{K'\sigma V}{r} \quad (5.46)$$

Si  $r=b\bar{D}$ , donde  $b$  es una constante y tomando  $K=K'/b$ , entonces el cambio en el tamaño de grano promedio se puede expresar como:

$$\frac{d\bar{D}}{dt} = \frac{K\sigma V}{\bar{D}} \quad (5.47)$$

El tamaño de grano entonces puede obtenerse como una función del tiempo del tratamiento  $t$ , integrando la ecuación anterior en el intervalo  $t=0$  a  $t=t$ :

$$\bar{D}^2 - \bar{D}_0^2 = K\sigma Vt \quad (5.48)$$

En donde  $\bar{D}_0$  es el tamaño inicial (promedio) del grano. La ecuación anterior es válida para un crecimiento de grano conducido por la curvatura donde las fronteras migran con una movilidad  $m$ .

Se han reportado ecuaciones para determinar el crecimiento de grano antes y durante el laminado en caliente aceros. Para calcular el tamaño de grano de un grano dinámicamente recristalizado (justo después de la deformación) se tienen ecuaciones de la forma [39]:

(5.49)

$$D = c_2 D_0^{c'} \varepsilon^{-n'} Z^{-K'}$$

Mientras que para austenita deformada se propuso la siguiente ecuación [51]:

$$D_{din} = 22600 \left[ \dot{\varepsilon} \exp\left(\frac{Q}{RT}\right) \right]^{-0.27} \quad (5.50)$$

El tamaño de grano recristalizado se puede expresar de una forma más general en función del tamaño de grano inicial, la velocidad de deformación y de la temperatura de la siguiente manera [52]:

$$d_{rex} = a_n d_0^{h_n} \varepsilon^{n_n} \dot{\varepsilon}^{m_n} \exp(Q_n / RT) + c_n \quad (5.51)$$

(si  $d_{rex} \geq d_0$  entonces  $d_{rex} = d_0$ )

donde los parámetros  $a_n$ ,  $Q_n$  y  $c_n$  cambian dependiendo del tipo de recristalización.

Si la recristalización es incompleta puede utilizarse una regla de mezclas para determinar un tamaño de grano promedio [52]:

$$D = X_{rex}D_{rex} + (1 - X_{rex})D_0 \quad (5.52)$$

En lo que se refiere al crecimiento anormal de grano, éste puede ocurrir si una fracción pequeña de granos en el material, es mayor que  $2R_{cr}$ , donde  $R_{cr}$  es un radio crítico [35].

$$R_G = 2R_{cr} \quad (5.53)$$

El crecimiento de grano ocurre antes del inicio de la recristalización o después de que termina la recristalización. La cinética se describe mediante la ecuación (5.54) [52]:

$$d_g = \left[ d_{rex}^m + a_g t \exp\left(-\frac{Q_g}{RT}\right) \right]^{1/m} \quad (5.54)$$

$d_g$  indica el tamaño de grano después del crecimiento,  $a_g$  y  $m$  son constantes del material, y  $Q_g$  es la energía de deformación.

## 5.6. Recristalización en aceros eléctricos

La recristalización juega un papel importante en la manufactura de los aceros eléctricos ya que puede ayudar a obtener un control apropiado sobre la microestructura y la textura. La microestructura recristalizada de un acero eléctrico también jugará un papel importante sobre las pérdidas de energía (mencionadas en la sección 2.4).

A altas temperaturas de trabajo en caliente, se ha aceptado generalmente que la recuperación domina al proceso de restauración de un acero ferrítico al silicio [5].

La presencia de la austenita durante la deformación y el valor actual de la temperatura de deformación contribuyen al desarrollo de la microestructura, y por lo tanto, al proceso de recrystalización. Las partículas de austenita son más duras que las de la matriz de ferrita ( $\alpha$ ) y se esperaría que la densidad de dislocaciones introducidas por la deformación cerca de estas partículas sea mayor que en las fronteras  $\alpha$ - $\alpha$ . Se ha reportado que la presencia de austenita acelera la recrystalización durante la deformación siendo mayor el efecto para materiales de grano grueso ( $d_o \approx 850 \mu\text{m}$ ) [53].

Una tendencia similar se observa con la cantidad de deformación aplicada durante un proceso de laminación en caliente, en la que al aumentar la cantidad de deformación también se acelera el proceso de recrystalización, resultando en un decremento en el tamaño de grano recrystalizado, el cual se hace más sensible a la temperatura de deformación (parámetro Zener-Hollomon) siempre y cuando se obtengan microestructuras deformadas en estado estable [54].

El tamaño de grano en la microestructura final recrystalizada está determinado principalmente por la frecuencia de nuevos granos que nuclean, mientras que la textura está determinada por la orientación de los nuevos granos que nuclean (ventaja de frecuencia) o la orientación de los granos que crecen más rápido (ventaja de tamaño).

La condición del tratamiento térmico puede afectar al tamaño final de grano como el que se muestra en la Tabla 5.2 para un acero eléctrico con 3.2% de silicio sometido a un proceso de laminado en caliente, seguido de un tratamiento de normalizado a 900°C, luego laminado en frío y recocido en 2 etapas a 900°C y a 1200°C [16].

Tabla 5.2. Comparación de tamaños de grano para un acero eléctrico tratado térmicamente [16].

<b>Condición</b>	<b>Tamaño de grano sin normalizar (<math>\mu\text{m}</math>)</b>	<b>Tamaño de grano normalizado (<math>\mu\text{m}</math>)</b>
Recrystalización primaria	24.6	40.2
Recrystalización secundaria	3520	12760

Hay dos teorías principales para la interpretación de la textura de recristalización a partir de la matriz deformada: la teoría de nucleación orientada y la teoría de crecimiento orientado [39]. En la primera, la activación preferida de un núcleo especial determina la textura de recristalización final, es decir, nuevos granos que tengan la orientación del mayor componente de textura de recristalización nuclearán a una frecuencia mucho mayor comparada con granos de otras orientaciones. En esta teoría se determina una fracción de nuevos granos orientados  $F_c$ :

$$F_c \gg \% \text{ de granos con cierta orientación} \quad (5.55)$$

En la segunda teoría, aquellos granos con la orientación requerida para la textura de recristalización crecerán más rápido que los granos con otras orientaciones, La predicción del crecimiento orientado se expresa mediante la siguiente ecuación, [55]:

$$G_c = rG \quad (r \gg 1) \quad (5.56)$$

donde  $G_c$  es la velocidad de crecimiento de los granos con la orientación de textura de recristalización (por ejemplo, orientación cúbica),  $G$  es la velocidad de crecimiento de los granos con orientación aleatoria y  $r$  es un factor de velocidad de crecimiento.



# CAPÍTULO 6

## MODELACIÓN MATEMÁTICA Y NUMÉRICA

### 6.1. Introducción

Es práctica común confundir las palabras modelación y simulación. No es posible simular un proceso si no se sabe como modelarlo. El proceso de modelar consiste en extraer todo el conocimiento científico y tecnológico sobre un sistema físico, organizar e interpretar este conocimiento apropiadamente y buscar reproducirlo ya sea mediante técnicas analíticas o técnicas numéricas para posteriormente hacer predicciones o modificaciones sobre el mismo [56,57].

Un modelo es llamado matemático cuando se reúne un conjunto de ecuaciones (normalmente son ecuaciones diferenciales) que representa las leyes de la naturaleza que

actúan sobre el sistema y posteriormente se busca resolverlas mediante diversos métodos considerando las condiciones iniciales y de frontera disponibles para el modelo. Una combinación “virtual” de la modelación física y matemática es la modelación computacional. En este tipo de modelación se utilizan herramientas de diseño y manufactura ayudados por computadora (CAD/CAM, por sus siglas en inglés) junto con algoritmos de programación para resolver las ecuaciones gobernantes y así poder “simular” el comportamiento del sistema en cuestión.

Si las relaciones que componen al modelo son relativamente simples, es posible utilizar métodos analíticos para obtener una solución exacta del problema de interés; a este proceso se le llama método analítico. Sin embargo, la mayoría de los sistemas en la vida real son extremadamente complejos y no es posible resolverlos por métodos analíticos, por lo tanto, se recurre a los métodos numéricos.

En los métodos analíticos el problema puede ser resuelto mediante un conjunto de ecuaciones que pueden ser reducidas a una sola solución a través de herramientas como álgebra, cálculo, ecuaciones diferenciales o ecuaciones diferenciales parciales. En los métodos numéricos se busca resolver el mismo tipo de problema pero ahora el procedimiento consistirá en resolverlo mediante ecuaciones algebraicas: sumas, restas, multiplicaciones, divisiones y comparaciones [58]. Las computadoras pueden resolver estas operaciones aritméticas en una forma muy rápida y eficiente; por lo tanto, el análisis numérico está íntimamente relacionado a las computadoras y el resultado final será una aproximación a la solución real.

Los modelos matemáticos para los tratamientos térmicos y para la evolución microestructural acoplan el campo de la cinética de transformaciones de fases y la cinética de recristalización y de crecimiento de grano junto con los campos termomecánicos y termodinámicos por lo que se puede predecir el efecto de las variaciones de dichos parámetros en las microestructuras finales y de esta forma evaluar las propiedades mecánicas, térmicas y microestructurales del material.

La generación de los modelos es bastante compleja dado que en el aspecto térmico es importante considerar la variación de las propiedades termofísicas y los coeficientes

de transferencia de calor con la temperatura, así como la generación de calor durante la transformación de fases. En el aspecto mecánico se deben considerar los cambios volumétricos de la geometría al ocurrir el cambio de fase que a su vez son dependientes de la temperatura. En el aspecto metalúrgico se debe tomar en cuenta la variación de la microestructura que terminará como consecuencia en cambios en las propiedades finales del producto. En la Figura 28 se muestra en forma esquemática la interacción de estos campos sobre la pieza o material a analizar.

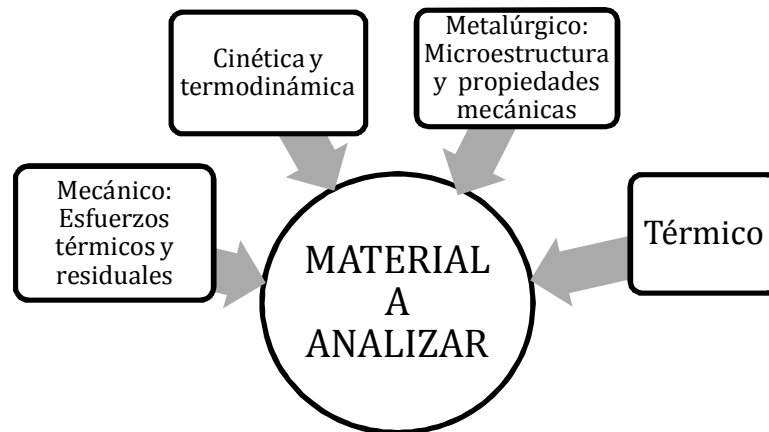


Figura 28.- Interacción de los diferentes campos de ingeniería para el estudio de transformaciones de fases en el acero.

Por lo tanto, se requiere de un cálculo apropiado de valores de temperatura, microestructura y esfuerzos. Los modelos pueden agruparse de acuerdo a una escala característica. Existen 4 escalas principales: macroscópica, mesoscópica, microscópica y nanoscópica. La escala macroscópica se refiere a la geometría modelada, en la escala mesoscópica se estudian los defectos de la red cristalina en la escala de los granos, la escala microscópica trabaja debajo de la escala de los granos y la escala nanoscópica trabaja en el nivel atómico.

## 6.2. Análisis térmico

Para el análisis térmico se tiene la ecuación de conservación de la energía [59]:

$$\frac{\partial}{\partial x_1} \left( k \frac{\partial T}{\partial x_1} \right) + \frac{\partial}{\partial x_2} \left( k \frac{\partial T}{\partial x_2} \right) + \frac{\partial}{\partial x_3} \left( k \frac{\partial T}{\partial x_3} \right) + Q = \rho c_p \frac{\partial T}{\partial t} \quad (6.1)$$

Los  $x_i$  representan los ejes coordenados  $x$  ( $x_1$ ),  $y$  ( $x_2$ ) y  $z$  ( $x_3$ ),  $k$  es la conductividad térmica del material,  $\rho$  la densidad,  $c_p$  el calor específico y el término  $Q$  es la generación de calor por unidad de volumen y por unidad de tiempo correspondiente al cambio de fase (por ejemplo: transformación de austenita a ferrita en aceros, o un cambio de fase sólida a fase líquida) y se puede obtener con la siguiente ecuación [60]:

$$Q(t, T) = \Delta H \frac{dX}{dt} \approx \Delta H \frac{X_i - X_{i-1}}{\Delta t} \quad (6.2)$$

De la ecuación anterior  $\Delta H$  representa una energía (entalpía) de transformación de fase y  $X$  es la fracción volumétrica.

Para resolver la ecuación (6.1) se requiere establecer las condiciones iniciales (temperatura inicial) sobre un dominio (sistema a analizar)  $\Omega$ :

$$T(t=0) = T_o \quad \in \quad \Omega \quad (6.3)$$

y de condiciones frontera, que en el caso particular de este trabajo serán condiciones de convección y de radiación sobre superficies  $\Gamma_c$  y  $\Gamma_r$  respectivamente (ver sección 7.2):

$$-k \frac{dT}{dx_i} \hat{n} = h(T_s - T_\infty) \quad \text{sobre } \Gamma_c \quad (6.4)$$

$$-k \frac{dT}{dx_i} \hat{n} = \varepsilon \sigma (T_s^4 - T_\infty^4) \quad \text{sobre } \Gamma_r \quad (6.5)$$

donde  $T_s$  es la temperatura de la superficie,  $T_\infty$  es la temperatura ambiente,  $h$  es un coeficiente de transferencia de calor,  $\varepsilon$  es la emisividad y  $\sigma$  la constante de Stefan-Boltzmann.

### 6.3. Análisis de deformación plástica

Las ecuaciones gobernantes (en notación de índices) para la solución de la mecánica de deformación plástica para materiales rígido-plásticos y rígido-viscoplásticos son las siguientes [61]:

$$\frac{\partial \sigma_{ij}}{\partial x_j} = 0 \quad (\text{Ecuaciones de equilibrio}) \quad (6.6)$$

$$\bar{\sigma} = \sqrt{\frac{3}{2} (\sigma_{ij}' \sigma_{ij}')^{1/2}} = \bar{\sigma}(\bar{\varepsilon}, \dot{\bar{\varepsilon}}) \quad (\text{Criterio de fluencia}) \quad (6.7)$$

$$\text{Ecuaciones constitutivas} \quad \left\{ \begin{array}{l} \dot{\varepsilon}_{ij} = \frac{3}{2} \frac{\dot{\bar{\varepsilon}}}{\bar{\sigma}} \sigma_{ij}' \\ \dot{\bar{\varepsilon}} = \sqrt{\frac{2}{3}} (\dot{\varepsilon}_{ij} \dot{\varepsilon}_{ij}) \end{array} \right. \quad (6.8)$$

$$\dot{\bar{\varepsilon}} = \sqrt{\frac{2}{3}} (\dot{\varepsilon}_{ij} \dot{\varepsilon}_{ij}) \quad (6.9)$$

$$\dot{\varepsilon}_{ij} = \frac{1}{2} \left( \frac{\partial u_i}{\partial x_j} + \frac{\partial u_j}{\partial x_i} \right) \quad (\text{Condiciones de compatibilidad}) \quad (6.10)$$

De las ecuaciones anteriores,  $\sigma_{ij}$  representa a los componentes del tensor de esfuerzos,  $\sigma_{ij}'$  son los componentes del tensor de esfuerzo reducido (responsable para la deformación plástica),  $\bar{\sigma}$  es el esfuerzo de fluencia (a veces llamado efectivo o equivalente),  $\dot{\bar{\varepsilon}}$  es la velocidad de deformación efectiva y  $\dot{\varepsilon}_{ij}$  es la velocidad de

deformación. Los valores desconocidos serán los 6 componentes de esfuerzos y los 3 componentes de velocidad ( $u_i$ ) para un análisis quasi-estático de deformación plástica. Es demasiado complejo encontrar una solución analítica para todas las ecuaciones gobernantes por lo que se requiere de un método de aproximación, en este caso será el método variacional, el cual será descrito más adelante en la sección 6.4.2.

## 6.4. Método de elemento finito (MEF)

Las ecuaciones (6.1) y (6.6) a la (6.10) son demasiado complejas para ser resueltas mediante métodos analíticos. Cabe resaltar que las soluciones analíticas proporcionan una solución, la cual puede ser una función o una serie infinita de la cual se puede escoger un número infinito de puntos en todo el dominio y aplicarlos sobre esa función para obtener un resultado. Los sistemas con estas características son conocidos como sistemas continuos. De forma alternativa, un sistema puede ser definido como una colección de componentes o elementos sobre los cuales la respuesta del sistema puede ser descrita mediante la solución de un número finito de valores desconocidos. Tales sistemas se conocen como sistemas discretos. El procedimiento para convertir un sistema continuo a un sistema discreto se conoce como discretización. Este proceso involucra una aproximación la cual debe mejorar conforme se incrementa el número de variables discretas [62]. Esto representa una ventaja porque hoy en día se cuenta con computadoras que utilizan procesadores de alta velocidad, y por lo tanto, es posible resolver un problema discreto en una cantidad relativamente corta de tiempo.

El método de elemento finito (MEF) puede ser definido como una técnica numérica utilizada para obtener una solución aproximada de un problema de ingeniería. El procedimiento de discretización consiste en dividir el sistema continuo en elementos que se encuentran conectados por nodos. El MEF permite utilizar elementos de diversas geometrías tales como triángulos, rectángulos o cuadriláteros en 2 dimensiones o elementos hexaédricos o tetraédricos en 3 dimensiones sobre los que se aplica una formulación.

El MEF no ofrece restricción al trabajar con una geometría compleja dado que los elementos pueden ser elegidos de cualquier tamaño, forma y cualquier orientación para ajustarse a la geometría dada.

En el MEF las ecuaciones son definidas en forma independiente para cada elemento y se tienen como herramienta los siguientes métodos, siendo los primeros dos los más utilizados en la rama de ingeniería [63], por lo que se hará un mayor énfasis en éstos:

- Método variacional: Los métodos basados en energía, como por ejemplo el principio de Hamilton o el principio de energía potencial mínima son considerados como una forma especial del principio variacional.
- Métodos de residuos ponderados.
- Métodos basados en la serie de Taylor (MDF).
- Métodos basados en las leyes de conservación sobre volúmenes de control (MVF).
- Representación integral (métodos libres de malla).

Posteriormente se hace una interconexión de todas las relaciones obtenidas para llegar a obtener un conjunto matricial (global) de ecuaciones con un cierto número de incógnitas de la forma  $\mathbf{Ku}=\mathbf{F}$  que deberá ser resuelto para obtener la solución final aproximada.

#### 6.4.1. Método de aproximación directa

Con este método es posible resolver problemas aplicando un razonamiento físico directo; es decir, las ecuaciones que rigen el modelo son relativamente sencillas y no exigen un análisis matemático riguroso. Los elementos discretos pueden ser sencillamente identificados y las propiedades de cada elemento son obtenidas para hacer un ensamble del sistema entero [63].

Ejemplos de este tipo de sistemas incluyen sistemas de resortes, redes hidráulicas, redes eléctricas, problemas de transferencia de calor en una dimensión y estructuras. En la Figura 29 se muestran 2 ejemplos en los que se puede aplicar este método. En el caso de la Figura 29a), cada resorte con constante elástica  $k_j$  puede representarse como un elemento y la relación que existe entre fuerza y desplazamiento es la ley de Hooke ( $F=k\delta$ ). El caso del a Figura 29b) es un problema de transferencia de calor y en este caso el sistema se representa por un solo elemento y los flujos de calor se obtienen aplicando la ley de Fourier.

Nótese que para ambos sistemas se llega a un sistema matricial de la forma  $\mathbf{Ku}=\mathbf{F}$ , además se puede observar que dentro de la matriz  $K$  están contenidas las propiedades de los elementos; a esta matriz se le conoce como **matriz de rigidez**.

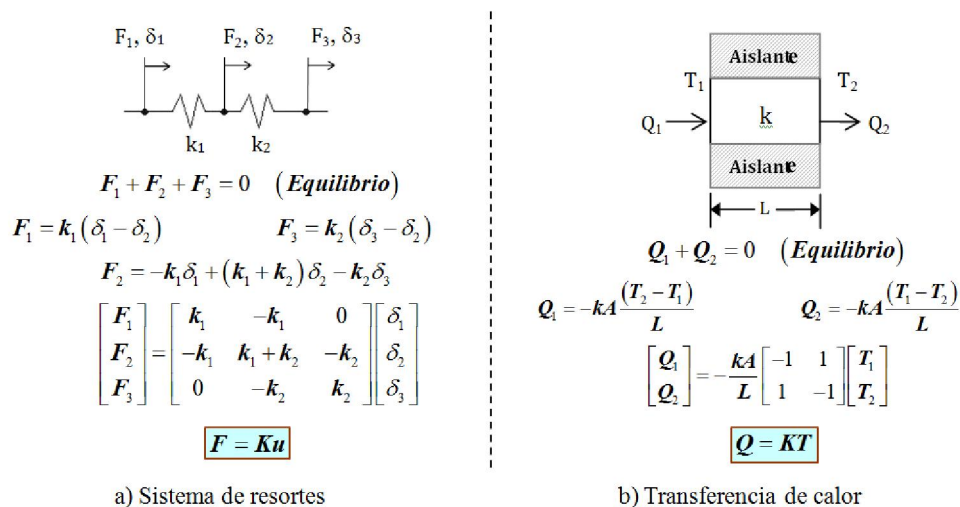


Figura 29.-Aplicaciones del método de aproximación directa.

#### 6.4.2. Método de Ritz

El método de Ritz es un método variacional en el cual se busca obtener una solución aproximada para el problema en cuestión utilizando una combinación lineal de funciones de prueba  $\psi_i$  con parámetros indeterminados  $c_i$ . Para poder aplicar este método así como todos los métodos variacionales se requiere contar con un funcional el cual es



extremizado diferenciándolo con respecto a cada variable desconocida  $c_i$ . De este procedimiento se obtiene un sistema de  $n$  ecuaciones simultáneas de las cuales se obtendrá cada valor  $c_i$ . En el método de Ritz las funciones de prueba definen completamente al dominio que se está analizando y deben de satisfacer las condiciones frontera presentes en éste [63,64]. El funcional,  $I$ , puede ser representado en 2D por la ecuación:

$$I(\phi) = \iint F(\phi, \phi_x, \phi_{xx}, \phi_{xy}, \dots) dx dy \quad (6.11)$$

En la ecuación (6.11),  $F$  puede depender de una función  $\phi$  así como de sus derivadas parciales ( $\phi_x, \phi_{xx}, \phi_{xy}, \dots$ ). Por ejemplo en una dimensión la solución original  $\phi$  puede ser aproximada a una función  $\tilde{\phi}$  en un intervalo  $[x_1, x_2]$  utilizando una combinación lineal de las funciones de prueba:

$$\phi(\mathbf{x}) \approx \tilde{\phi}(\mathbf{x}) = \psi_0 + \psi_i c_i \quad (6.12)$$

En esta ecuación  $\psi_i$  representa a las funciones de prueba. Existen  $n$  coeficientes  $c_i$  a ser determinados. Una vez que estas funciones son elegidas de tal forma que cumplan las condiciones frontera, son introducidas en el funcional el cual es posteriormente extremizado con respecto a cada coeficiente  $c_i$ :

$$\frac{\partial}{\partial c_i} [I(\tilde{\phi})] = 0 \quad (6.13)$$

El grado de aproximación para la solución del problema dependerá del número de términos elegidos para la función de prueba.

Como se mencionó previamente el MEF consiste en subdividir el dominio en entidades conocidas como elementos unidos por nodos. Aplicando el concepto del método de Ritz a esta técnica numérica, el funcional ahora será minimizado para cada elemento en forma independiente y posteriormente se sumarán todas las contribuciones de cada uno de los funcionales extremizados para cada elemento y de esta forma se obtendrá el sistema global de ecuaciones. En este caso las funciones de prueba ahora

serán conocidas con el nombre de funciones de interpolación o funciones de forma ( $N_i$ ). Ahora para cada elemento existirán  $n$  variables desconocidas donde  $n$  ahora será el número de nodos por elemento:

$$\mathbf{u}^{(e)} = N_i \mathbf{u}_i \quad (6.14)$$

$$\frac{\partial}{\partial \mathbf{u}_j} [\mathbf{I}^{(e)}] = 0 \quad j = 1, 2, \dots, n \quad (6.15)$$

En el caso de que exista un funcional cuadrático, es decir, que la función  $u$  y sus derivadas tienen como grado máximo 2 la ecuación (6.15) tendrá la siguiente forma [65]:

$$\frac{\partial}{\partial \mathbf{u}_j} [\mathbf{I}^{(e)}] = \mathbf{K}\mathbf{u} - \mathbf{f} = 0 \quad (6.16)$$

#### 6.4.3. Método de residuos ponderados

El método de residuos ponderados representa otra forma de obtener una formulación para el MEF. Esta técnica es apropiada cuando no se dispone del funcional en el método variacional. Esto es debido a que aún y cuando todos los problemas físicos pueden ser representados mediante un funcional la obtención de éste puede ser relativamente complicada. El procedimiento puede explicarse de la siguiente manera [62-64], teniendo una ecuación diferencial de la siguiente forma:

$$\mathbf{f}(\phi(x_1, x_2)) = \mathbf{D}_{x_1} \frac{\partial^2 \phi}{\partial x_1^2} + \mathbf{D}_{x_2} \frac{\partial^2 \phi}{\partial x_2^2} - \mathbf{g}\phi + \mathbf{Q} = 0 \quad (6.17)$$

donde  $D_{x_1}$  y  $D_{x_2}$ ,  $g$  y  $Q$  son constantes físicas. Inicialmente se aplica el concepto del método de Ritz utilizando las funciones de aproximación de la ecuación (6.14). Sustituyendo la ecuación (6.14) en la ecuación (6.17) origina un valor llamado residuo (R) o error, el cual será diferente de cero debido a que la función de prueba está siendo utilizada para aproximar a la solución original:

$$\mathbf{R} = \mathbf{f}(\tilde{\phi}(\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2)) \neq 0 \quad (6.18)$$

donde  $R$  también estará en función de los valores desconocidos  $u_i$ . Ahora los valores  $u_i$  serán determinados de tal forma que  $R$  desaparezca en un sentido promedio sobre el dominio completo, es decir:

$$\int_{\Omega} w_i \mathbf{R} d\Omega = 0 \quad (6.19)$$

Los  $w_i$  son llamados funciones de ponderación. Según la elección de estas funciones es el nombre que se le da al método [63]:

1. Método de Galerkin ( $w_i = N_i$ ).
2. Método de Petrov-Galerkin ( $w_i \neq N_i$ ).
3. Método de subdominio ( $w_i = 1$ ).
4. Método de mínimos cuadrados ( $w_i = \partial R / \partial u_i$ ).
5. Método de colocación ( $w_i = \delta_i$ ).  $\delta$  es la función delta de Dirac (impulso).

## 6.5. Análisis numérico mediante MEF

### 6.5.1. Análisis térmico mediante el método de residuos ponderados

Se requiere expresar la ecuación (6.1) en la forma de la ecuación (6.19) aplicando el método de residuos ponderados:

$$\int_{\Omega} w_i \left[ \frac{\partial}{\partial x_1} \left( k \frac{\partial T}{\partial x_1} \right) + \frac{\partial}{\partial x_2} \left( k \frac{\partial T}{\partial x_2} \right) + \frac{\partial}{\partial x_3} \left( k \frac{\partial T}{\partial x_3} \right) + Q - \rho c_p \frac{\partial T}{\partial t} \right] d\Omega = 0 \quad (6.20)$$

Es posible aproximar la temperatura utilizando las funciones de interpolación [63]:

$$T(x_i, t) = N_i(x_i)T_i(t) \quad i = 1, 2, \dots, n \quad (6.21)$$

donde  $n$  es el número de nodos para el elemento. Aplicando el método de Galerkin,  $w_i = N_i$  se sustituye en la ecuación (6.20):

$$\int_{\Omega} N_i \left[ \frac{\partial}{\partial x_1} \left( k \frac{\partial T}{\partial x_1} \right) + \frac{\partial}{\partial x_2} \left( k \frac{\partial T}{\partial x_2} \right) + \frac{\partial}{\partial x_3} \left( k \frac{\partial T}{\partial x_3} \right) + Q - \rho c_p \frac{\partial T}{\partial t} \right] d\Omega = 0 \quad (6.22)$$

El coeficiente de conductividad térmica así como el calor específico y la densidad pueden depender de la temperatura. De acuerdo con el teorema de Green [65]:

$$\int_{\Omega} N_i \frac{\partial^2 T}{\partial x_1^2} d\Omega = - \int_{\Omega} \frac{\partial N_i}{\partial x_1} \frac{\partial T}{\partial x_1} d\Omega + \int_{\Gamma} N_i \frac{\partial T}{\partial x_1} \hat{n}_1 d\Gamma \quad (6.23)$$

El teorema puede ser aplicado sobre la ecuación (6.22) para obtener la ecuación (6.24):

$$\begin{aligned} & - \int_{\Omega} \left[ k \frac{\partial N_i}{\partial x_1} \frac{\partial T}{\partial x_1} + k \frac{\partial N_i}{\partial x_2} \frac{\partial T}{\partial x_2} + k \frac{\partial N_i}{\partial x_3} \frac{\partial T}{\partial x_3} - Q N_i + \rho c_p N_i \frac{\partial T}{\partial t} \right] d\Omega \\ & + \int_{\Gamma} N_i \left[ k \frac{\partial T}{\partial x_1} \hat{n}_1 + k \frac{\partial T}{\partial x_2} \hat{n}_2 + k \frac{\partial T}{\partial x_3} \hat{n}_3 \right] d\Gamma = 0 \end{aligned} \quad (6.24)$$

En la ecuación (6.24) se sustituyen las condiciones frontera, ecuaciones (6.4) y (6.5) para las zonas de análisis sobre la integral de superficie:

$$\begin{aligned} & \int_{\Gamma} \left[ k N_i \frac{\partial T}{\partial x_1} \hat{n}_1 + k N_i \frac{\partial T}{\partial x_2} \hat{n}_2 + k N_i \frac{\partial T}{\partial x_3} \hat{n}_3 \right] d\Gamma = \\ & \int_{\Gamma} N_i h (T_s - T_{\infty}) d\Gamma_c + \int_{\Gamma_r} \varepsilon \sigma (T_s^4 - T_{\infty}^4) d\Gamma_r \end{aligned} \quad (6.25)$$

De la ecuación (6.25) se determina la derivada parcial de  $T$  con respecto a cada una de las coordenadas  $x_1$ ,  $x_2$  y  $x_3$  y se obtiene la ecuación:

$$\frac{\partial T}{\partial x_j} = \frac{\partial N_i}{\partial x_j} T_i(t) \quad (6.26)$$

Sustituyendo ahora la ecuación (6.26) en la ecuación (6.24) se obtiene la siguiente ecuación:

$$\begin{aligned} & -\int_{\Omega} \left( \mathbf{k} \frac{\partial N_i}{\partial x_1} \frac{\partial N_j}{\partial x_1} T_j(t) + \mathbf{k} \frac{\partial N_i}{\partial x_2} \frac{\partial N_j}{\partial x_2} T_j(t) + N_i \rho c_p \frac{\partial T_j}{\partial t} N_j - Q N_i \right) d\Omega \\ & + \int_{\Gamma} N_i \left[ \mathbf{k} \frac{\partial T}{\partial x_1} \hat{n}_1 + \mathbf{k} \frac{\partial T}{\partial x_2} \hat{n}_2 + \mathbf{k} \frac{\partial T}{\partial x_3} \hat{n}_3 \right] d\Gamma = 0 \end{aligned} \quad (6.27)$$

Finalmente, sustituyendo la ecuación (6.25) en la ecuación (6.27) y ordenando términos se puede obtener la siguiente forma matricial:

$$[\mathbf{C}] \left\{ \frac{\partial T}{\partial t} \right\} + [\mathbf{K}][T] = [\mathbf{f}] \quad (6.28)$$

en la cual:

$$[\mathbf{C}] = c_{ij} = -\int_{\Omega} \rho c_p N_i N_j d\Omega \quad (6.29)$$

$$[\mathbf{K}] = k_{ij} = -\int_{\Omega} \left\{ \left( \mathbf{k} \frac{\partial N_i}{\partial x_1} \frac{\partial N_j}{\partial x_1} + \mathbf{k} \frac{\partial N_i}{\partial x_2} \frac{\partial N_j}{\partial x_2} + \mathbf{k} \frac{\partial N_i}{\partial x_3} \frac{\partial N_j}{\partial x_3} \right) \right\} d\Omega + \int_{\Gamma_c} h N_i N_j d\Gamma_c \quad (6.30)$$

$$[\mathbf{f}] = f_i = -\int_{\Omega} Q N_i d\Omega + \int_{\Gamma_c} N_i h T_{\infty} d\Gamma_c - \int_{\Gamma_r} N_i \varepsilon \sigma (T_s^4 - T_{\infty}^4) d\Gamma_r \quad (6.31)$$

Al suponer condiciones de estado estable la ecuación (6.28) tomaría exactamente la misma forma que la ecuación (6.16) dado que el término  $[\mathbf{C}][\partial T/\partial t]$  sería cero. La matriz  $C$  es conocida como matriz de capacitancia y a la matriz  $K$  se le sigue llamando matriz de rigidez [63]. Cabe resaltar que al considerar el fenómeno de radiación la ecuación (6.31) es no lineal por lo que se utilizan técnicas iterativas para la solución de este tipo de ecuaciones. Algunos paquetes comerciales utilizan esta formulación para resolver los

problemas térmicos. Entre estos paquetes destacan ABAQUS y DEFORM los cuales utilizan el método Newton-Raphson.

La ecuación (6.28) puede considerarse como una ecuación semidiscreta debido al primer término  $[C][\partial T/\partial t]$ .  $\partial T/\partial t$  se puede aproximar mediante una ecuación de diferencias:

$$\left. \frac{\partial T}{\partial t} \right|^{t+\Delta t} = \frac{T^{t+\Delta t} - T^t}{\Delta t} \quad (6.32)$$

La ecuación (6.32) sugiere evaluar la ecuación (6.28) utilizando un esquema de solución para cada intervalo de tiempo  $\Delta t$  durante el análisis. Si se introduce un parámetro  $\theta$  tal que [63,66]:

$$T^{t+\theta} = \theta T^{t+\Delta t} + (1-\theta) T^t \quad (6.33)$$

sustituyendo la ecuación (6.32) en la ecuación (6.28) se obtiene:

$$[C] \left\{ \frac{T^{t+\Delta t} - T^t}{\Delta t} \right\} + [K][T]^{t+\theta} = [f]^{t+\theta} \quad (6.34)$$

y sustituyendo la ecuación (6.33) en la ecuación (6.34) se obtiene la siguiente ecuación:

$$[C] \left\{ \frac{T^{t+\Delta t} - T^t}{\Delta t} \right\} + [K][\theta T^{t+\Delta t} + (1-\theta) T^t] = [\theta f^{t+\Delta t} + (1-\theta) f^t] \quad (6.35)$$

ordenando términos se obtiene finalmente la ecuación (6.36):

$$([C] + \theta \Delta t [K])[T]^{t+\Delta t} = ([C] + (1-\theta) \Delta t [K])[T]^t + \Delta t (\theta [f]^{t+\Delta t} + (1-\theta) [f]^t) \quad (6.36)$$

La ecuación (6.36) proporcionará los valores nodales de temperatura para un tiempo  $t+\Delta t$ .

Si  $\theta=0$  la ecuación (6.36) se reduce a:

$$[C][T]^{t+\Delta t} = ([C] + \Delta t[K])[T]^t + \Delta t[f]^t \quad (6.37)$$

Esta ecuación representa un esquema explícito, es decir, que los valores nodales de temperatura a ser calculados para un tiempo  $t + \Delta t$  pueden ser obtenidos directamente a partir de los valores nodales conocidos de un tiempo anterior  $t$ . Para evitar el cálculo de la matriz inversa de  $[C]$  se utiliza un proceso de diagonalización para la matriz permitiendo de esta manera realizar el cálculo directamente para cada valor nodal de temperatura.

Si  $\theta=1$  la ecuación (6.37) se reduce a:

$$([C] + \Delta t[K])[T]^{t+\Delta t} = [C][T]^t + \Delta t[f]^{t+\Delta t} \quad (6.38)$$

Esta ecuación representa un esquema implícito. En este esquema siempre se recurrirá al cálculo de una matriz inversa para poder obtener los valores nodales de temperatura para cada periodo  $\Delta t$  en que sea dividido el análisis.

Haciendo una pequeña comparación de ambos esquemas el método explícito se caracteriza por presentar una rápida solución de la ecuación discretizada. Sin embargo, este esquema es condicionalmente estable, es decir, el valor  $\Delta t$  debe ser menor a un valor  $\Delta t$  crítico. De lo contrario el comportamiento de la solución del sistema presentará oscilaciones que no permitirán la convergencia hacia la solución del problema.

Los esquemas implícitos por el caso contrario no presentan este problema de estabilidad proporcionando una mayor libertad de elección para el valor  $\Delta t$ . Sin embargo, los tiempos de solución pueden ser considerablemente mayores debido al cálculo de la matriz inversa para cada  $\Delta t$ , aunado a que requiere de una mayor cantidad de espacio en el disco de la computadora para almacenar la información, aunque este método también tiene sus ventajas dado que en el caso particular de procesos de larga duración en un esquema explícito el valor  $\Delta t$  crítico podría ser exageradamente pequeño y su tiempo de solución podría ser considerablemente mayor al del esquema implícito.

### 6.5.2. Análisis de deformación plástica mediante el método variacional

Se tiene el siguiente funcional [61] que representa la energía potencial del sistema que se divide en la energía interna del material (energía de deformación) y en la energía o trabajo realizado por las cargas externas:

$$\text{Para materiales rígido-plásticos} \quad \pi = \int_{\Omega} \bar{\sigma} \dot{\varepsilon} d\Omega - \int_{\Gamma} F_i u_i d\Gamma \quad (6.39)$$

$$\text{Para materiales rígido-viscoplásticos} \quad \pi = \int_{\Omega} E(\dot{\varepsilon}_{ij}) d\Omega - \int_{\Gamma} F_i u_i d\Gamma \quad (6.40)$$

$F_i$  representa una tracción en la superficie (cargas aplicadas) y  $E(\dot{\varepsilon}_{ij})$  es una función de trabajo (energía). La solución se obtendrá minimizando el funcional mediante la primera variación (operador  $\delta$ ):

$$\delta\pi = \int_{\Omega} \bar{\sigma} \delta \dot{\varepsilon} d\Omega - \int_{\Gamma} F_i \delta u_i d\Gamma = 0 \quad (6.41)$$

La condición de incompresibilidad en los campos de velocidad de la ecuación anterior se pueden remover utilizando multiplicadores de Lagrange  $\lambda$  lo cual modifica la ecuación de la siguiente manera:

$$\delta\pi = \int_{\Omega} \bar{\sigma} \delta \dot{\varepsilon} d\Omega + \int_{\Omega} \lambda \delta \dot{\varepsilon}_{ii} d\Omega + \int_{\Omega} \dot{\varepsilon}_{ii} \delta \lambda d\Omega - \int_{\Gamma} F_i \delta u_i d\Gamma = 0 \quad (6.42)$$

Las ecuaciones (6.41) y (6.42) se pueden expresar en términos de velocidades nodales  $v$  con sus respectivas variaciones mediante la siguiente ecuación:

$$\frac{\partial \pi}{\partial v_l} = \sum_i \left( \frac{\partial \pi}{\partial v_l} \right)_i = 0 \quad (6.43)$$



El subíndice  $i$  indica el elemento y el subíndice  $I$  indica el nodo. La ecuación (6.43) se evalúa en cada elemento y posteriormente es ensamblada en todos los elementos (ensamble global) a partir de la cual se obtendrá finalmente una ecuación de la forma  $Ku=F$ . Sin embargo, en el formado de metales esta ecuación no es lineal por lo que existen formas alternativas para encontrar la solución de la ecuación  $Ku=F$ , normalmente aplicando métodos iterativos siendo los más comunes el método de gradientes conjugados y el método de Newton-Raphson.

El método de gradientes conjugados es un método que ayuda a minimizar un funcional de forma cuadrática de la forma [67]:

$$\phi(u) = \frac{1}{2} u \cdot Ku - F \cdot u \quad (6.44)$$

de la cual se puede obtener la siguiente ecuación:

$$\nabla \phi(u) = Ku - F \quad (6.45)$$

Y por lo tanto,  $u=K^{-1}F$  que resulta de la minimización de  $\phi$ . Inicialmente se estima el valor de  $u$  para la solución y se proporciona una dirección descendente  $P$  de tal forma que al suponer  $u$ ,  $\phi$  disminuye en la dirección de  $P$ . Si  $\phi$  disminuye en la dirección de  $P$ , entonces:

$$\phi(u + \alpha P) < \phi(u) \quad \alpha > 0 \quad (6.46)$$

Esto significa que la derivada direccional de  $\phi$  en la dirección de  $P$  es negativa, es decir:

$$\nabla \phi(u) \cdot P < 0 \quad (6.47)$$

en la dirección descendente, se minimizará  $\phi$  a lo largo de  $u + \alpha P$ .

El método de Newton-Raphson linealiza la ecuación (6.43) mediante una expansión de serie de Taylor de la siguiente manera:

$$\left[ \frac{\partial \pi}{\partial v_I} \right]_{v=v_0} + \left[ \frac{\partial^2 \pi}{\partial v_I \partial v_J} \right]_{v=v_0} \Delta v_J = 0 \quad (6.48)$$

En el cual  $\Delta v_J$  es un término de corrección de primer orden para una velocidad inicial  $v_0$  que se supone al iniciar el análisis. La ecuación (6.48) se reescribe nuevamente en la forma  $K\Delta v=f$ , y una vez que se obtiene la solución de la ecuación (6.48) la velocidad  $v_0$  se actualiza mediante  $v_0 + \alpha\Delta v$ , en la que  $\alpha$  es una constante entre 0 y 1 [61]. Se continúa la iteración hasta que los términos de corrección son despreciables. La Figura 30 muestra el proceso iterativo del método de Newton-Raphson.

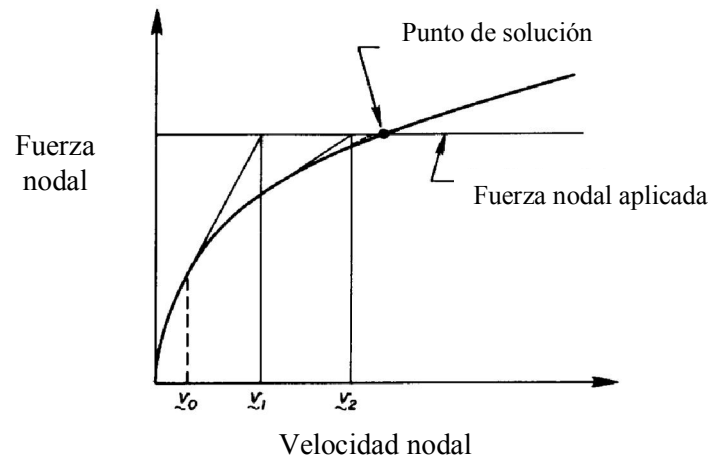


Figura 30.- Representación esquemática del método de Newton-Raphson.

Estos métodos se encuentran implementados en paquetes comerciales para la simulación de procesos de formado. Por ejemplo, el método de gradientes conjugados está implementado en los paquetes comerciales DEFORM y ANSYS mientras que ABAQUS utiliza la técnica iterativa de Newton-Raphson.

## 6.6. Modelos geométricos de microestructura

La heterogeneidad de la microestructura deformada requiere que se tome en cuenta la variación local y temporal de los fenómenos físicos. Esto se puede hacer discretizando la microestructura en tiempo y espacio. Existen 2 métodos para considerar lo anterior, un método energético y un método cinético. En el método energético el sistema busca una trayectoria hacia el estado de energía más bajo y en el método cinético se anticipa a esa trayectoria y se utilizan las respectivas relaciones cinéticas [68]. El método energético es el método de Monte-Carlo, y para el segundo, es el de autómatas celulares.

Srolovitz [69] utilizó extensivamente el método de Monte-Carlo para predecir la evolución de la microestructura durante el crecimiento de grano y también durante la recristalización. El método de autómatas celulares para predecir las microestructuras de recristalización fue propuesto por Göbel y Hesselbarth [69]. En ambos casos, a cada celda discreta en el espacio se aplicó una regla de transformación para cambiar el estado de la celda a partir de un estado deformado para que recristalice o se mantenga sin cambio.

Un método apropiado para el cálculo de recristalización tiene que tomar en cuenta estas características microestructurales para poder reflejar apropiadamente la evolución de la microestructura recristalizada y la textura. Para tomar en cuenta la heterogeneidad espacial se requiere una discretización del espacio en rejas 3D, donde cada elemento de la reja contendrá la información microestructural actual (composición química, densidad de defectos cristalinos, orientación, variables de proceso como la temperatura y otros parámetros que cambien con el tiempo debido a las fluctuaciones térmicas).

### 6.6.1. Autómatas celulares (AC)

El método de AC es un método numérico utilizado para modelar procesos metalúrgicos basados en mecanismos de nucleación y crecimiento. Estos incluyen a la recrystalización dinámica, precipitación y crecimiento de grano [40,69].

El método de AC discretiza el espacio y el tiempo de sistemas complejos aplicando reglas de transformación determinísticas o probabilísticas ya sean a nivel local o global a los sitios de una red. Dicha red se puede definir en términos de un número fijo de celdas. Las reglas de transformación determinan el estado de una celda en función del estado previo y del estado de las celdas vecinas (local) o el estado de todas las celdas (global).

Las AC evolucionan en tamaños de tiempo discretos. Después de cada intervalo de tiempo los valores de las variables de estado se actualizan para todas las celdas. En el caso de la recrystalización y del tamaño de grano, el método de AC puede incorporar la textura cristalográfica local y la deformación en una manera discreta. Para describir estas características se puede utilizar la orientación del cristal,  $g$ , y la energía almacenada (en función de la densidad de dislocaciones y la temperatura). Estos parámetros son luego introducidos a las leyes de evolución de tal forma que pueda describirse el fenómeno que está siendo investigado.

El método de AC opera en una escala mesoscópica que está en el orden de granos y subgranos para las simulaciones de recrystalización pero puede acoplarse a otras escalas de longitud para producir modelos multiescala [40].

Existen 4 pasos para simular la recrystalización utilizando el método de AC [40]:

1. Definición del marco de las AC el cual consiste de su tamaño (número de elementos o celdas), el orden (dimensionalidad), sus vecinos (interacción entre celdas) y de condiciones frontera. La Figura 31 muestra algunos tipos de vecindades regulares que pueden definirse en 2 ó 3 dimensiones. Si el estado de una celda depende solamente de los vecinos más cercanos, el arreglo es llamado vecindad de von Neumann, Figura 31a. Si se incluyen los vecinos más cercanos y los próximos

vecinos más cercanos el arreglo es llamado vecindad de Moore, Figura 31b. En la vecindad extendida de Moore solo se incluyen 2 capas de vecinos, Figura 31c.

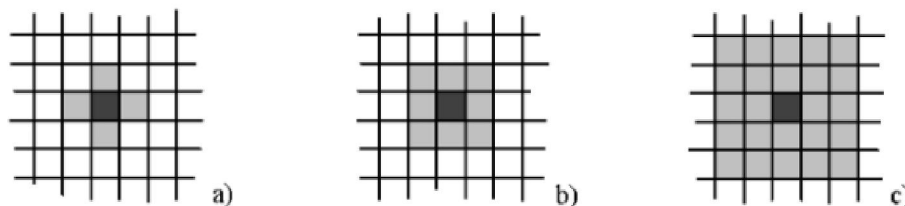


Figura 31.- Definiciones de los vecinos, a) Vecindad de von Neumann, b) Vecindad de Moore y c) Vecindad extendida de Moore [70].

Una vez que se determina el marco de las AC, éste debe ser escalado a longitudes y tiempos físicos lo cual se logra a través de una generación inicial de microestructura (paso 2) y a través de las reglas de nucleación y de crecimiento (paso 3).

2. Generación de la microestructura inicial: la microestructura puede ser el resultado de una simulación o de un modelo o puede capturarse de manera explícita a partir de datos experimentales. La ventaja del método de AC es que puede capturar comportamientos que no necesariamente deben ser explícitamente programados. Por ejemplo, oscilaciones del esfuerzo de fluencia durante la recristalización, lo que hace que la modelación sea mucho más sencilla que mediante modelos analíticos. Se debe tener cuidado al elegir la escala de longitud, la cual es definida mediante la distancia entre los centros de las celdas, y debe ser elegida de tal forma que el área (2D) o volumen (3D) sean representativos de la microestructura.

Para este proceso se utilizan algoritmos de creación de semillas (seeding) que requieren como datos de entrada la densidad de los granos, densidad de dislocaciones y la distribución de textura. Por ejemplo, la densidad de dislocaciones puede obtenerse mediante análisis de elemento finito, y posteriormente, se pueden utilizar técnicas de mapeo de la malla de elemento finito hacia la malla de las AC

aunque la transferencia de datos podría ser en una forma promediada ya que la relación entre ambas mallas no es uno a uno.

El único requerimiento para la transferencia de datos sería que la malla de las autómatas celulares (espaciamento entre celdas) sea menor que el espaciamento nodal de la malla de elemento finito de tal forma que las celdas adopten las mismas variables macroscópicas basado en la distribución de los nodos de elemento finito.

3. Nucleación y crecimiento de granos recristalizados: se utilizan reglas de transición que determinan como cambia el estado de las celdas en el arreglo. Eso incluye el inicio de la recristalización (reglas de nucleación) y a cómo responden con respecto a otras celdas similares o celdas diferentes (reglas de crecimiento). La regla de transición para la probabilidad de nucleación,  $P_N$ , se obtiene mediante la ecuación (6.49):

$$P_N = \frac{\dot{N}}{N_{CA}} dt \quad (6.49)$$

$\dot{N}$  es la velocidad de nucleación y  $N_{CA}$  es el número de celdas en las autómatas celulares. La probabilidad de crecimiento,  $P_G$ , se calcula mediante la ecuación (6.50):

$$P_G = \frac{v}{s_{CA}} dt \quad (6.50)$$

$v$  es la velocidad de migración de la interfase y  $s_{CA}$  es la distancia centro a centro entre celdas. En este caso, el movimiento de la frontera sería representado por la expansión de un grupo de celdas con la misma orientación. La frontera se define como la diferencia de orientaciones y  $v$  se calcula mediante las ecuaciones (5.9) y (5.10).

4. Cálculo de la densidad de dislocaciones: La nucleación de la recristalización en la simulación mediante AC tiene una regla basada en la que una celda alcance una

densidad de dislocaciones crítica. Para calcular la densidad de dislocaciones se puede utilizar la ecuación de Yoshie-Lassraoui-Jonas (YLJ) [40]:

$$d\rho_i = (h - r\rho_i) d\varepsilon \quad (6.51)$$

En la ecuación anterior  $h$  representa al endurecimiento por deformación y  $r\rho_i$  representa a la recuperación dinámica. La integración de la ecuación anterior lleva a la ecuación (5.2). El esfuerzo y la densidad de dislocaciones se relacionan mediante la ecuación (6.52) [71-74]:

$$\sigma = M\alpha_1 Gb\sqrt{\rho} \quad (6.52)$$

donde  $M$  es un factor de Taylor. Por lo tanto, diferenciando la ecuación anterior con respecto a  $\varepsilon$  se obtiene la ecuación (6.53):

$$\frac{d\rho}{d\varepsilon} = \frac{1}{(M\alpha_1 Gb)^2} 2\sigma \frac{d\sigma}{d\varepsilon} \quad (6.53)$$

Finalmente, la ecuación (6.51) se reescribe en función del esfuerzo utilizando las ecuaciones (6.52) y (6.53):

$$2\sigma \frac{d\sigma}{d\varepsilon} = r\sigma_\infty^2 - r\sigma^2 \quad (6.54)$$

La pendiente de la curva  $2\sigma \frac{d\sigma}{d\varepsilon}$  vs  $\sigma^2$  es  $r$  y de la intersección con el eje vertical se puede obtener  $h$ . De la ecuación (6.52),

$$\sigma_\infty = M\alpha_1 Gb\sqrt{\frac{h}{r}} \quad (6.55)$$

de la ecuación anterior se despeja  $h$ .

$$h = r\sigma_\infty^2 \left[ \frac{1}{M\alpha_1 Gb} \right]^2 \quad (6.56)$$

Los parámetros  $h$  y  $r$  también se pueden calcular mediante las ecuaciones (6.57) y (6.58) en función de la velocidad de deformación y de la temperatura [40,52]:

$$h = h_o \left( \frac{\dot{\varepsilon}}{\dot{\varepsilon}_o} \right)^{m_h} \exp\left( \frac{m_h Q_h}{RT} \right) \quad (6.57)$$

$$r = r_o \left( \frac{\dot{\varepsilon}}{\dot{\varepsilon}_o} \right)^{-m_r} \exp\left( -\frac{m_r Q_r}{RT} \right) \quad (6.58)$$

donde  $Q_r$  y  $Q_h$  son energías de activación,  $h_o$  y  $r_o$  son constantes,  $\dot{\varepsilon}_o = 1$  usualmente [33,60] y  $m_r$  y  $m_h$  son las sensibilidades a la velocidad de deformación de  $r$  y  $h$ , respectivamente. Una vez obtenida la densidad de dislocaciones se aplica la ecuación (6.59) para calcular el esfuerzo de fluencia relacionado con el tamaño de los subgranos y la presencia de precipitados [40,52,53,71]:

$$\sigma = \sigma_o + \sigma_p + \alpha_1 Gb \sqrt{\rho_i} + Gb \left( \frac{\alpha_2}{\delta} + \frac{\alpha_3}{D} \right) \quad (6.59)$$

$\sigma_o$  es el esfuerzo de cedencia del material,  $G$  es el módulo de corte,  $b$  es la magnitud del vector de Burgers,  $\delta$  es el tamaño de subgrano,  $D$  es un tamaño promedio de grano y  $\alpha_1$  y  $\alpha_2$  son constantes. El valor  $\sigma_p$  es un esfuerzo debido a la posible presencia de precipitados. Los precipitados pueden interferir con la movilidad de las dislocaciones que resultan en un endurecimiento por deformación (llamado anclaje de Zener) y  $\sigma_p$  se calcula mediante las ecuaciones (6.60) y (6.61) [71]:

$$\sigma_p = \frac{AGb}{1.24(2\pi)} \left[ \frac{1}{\lambda} \ln\left( \frac{\lambda}{b} \right) \right] \quad (6.60)$$

$$\lambda = 0.8 \left[ \left( \frac{\pi}{f_r} \right)^{1/2} - 2 \right] r_d \quad (6.61)$$

donde  $A$  es una constante geométrica,  $\lambda$  es una distancia media entre precipitados,  $f_r$  la fracción volumétrica de precipitados y  $r_d$  el radio de los precipitados.



En cada intervalo de tiempo,  $\Delta t$  se agrega la densidad de dislocaciones a la microestructura lo cual simula el endurecimiento por deformación asumiendo que  $\varepsilon$  es proporcional a  $\rho$  y  $\dot{\varepsilon}$  es proporcional a  $d\rho/dt$ . Posteriormente, la cantidad de dislocaciones que incrementa durante la deformación y el endurecimiento, se distribuye aleatoriamente en la microestructura.

Después, la densidad de dislocaciones se parte en 2 en un cierto número de celdas  $N$ , lo cual simula la recuperación dinámica [75]. La nucleación se obtiene chequeando la densidad de una fracción arbitraria de celdas en las fronteras de grano. Si la densidad de dislocaciones de la celda excede a una densidad promedio durante la recuperación dinámica, entonces la celda se convierte a un núcleo y su densidad es reiniciada a cero. Es decir, el estado de la celda su estado de una celda sin recrystalizar a una recrystalizada, y a partir de ahí podrá calcularse la fracción recrystalizada [76].

La densidad total de dislocaciones puede expresarse en función de una densidad de dislocaciones promedio ( $\rho_{rd}$ ) mediante la ecuación (6.62):

$$\rho_T = (\#total\ de\ celdas) \rho_{rd} \quad (6.62)$$

Considerando únicamente una recuperación dinámica, no hay una acumulación neta de dislocaciones, es decir las dislocaciones agregadas durante la deformación igualan a la pérdida de dislocaciones durante la recuperación en  $\Delta t$ :

$$(\#total\ de\ celdas) \frac{d\rho}{dt} = \frac{N\rho_{rd}}{2} \quad (6.63)$$

Utilizando las ecuaciones (6.62) y (6.63) se puede expresar el esfuerzo durante la recuperación dinámica mediante la ecuación (6.64):

$$\sigma_{rd} = \sqrt{\rho_T} = (\#total\ de\ celdas) \left[ \frac{2}{N} \frac{d\rho}{dt} \right]^{1/2} \quad (6.64)$$

Y considerando una ley de potencia entre el esfuerzo y las dislocaciones en estado estable (solamente en la recuperación dinámica) [75],

$$\sigma_{rd} = K \left( \frac{d\rho}{dt} \right)^m \quad (6.65)$$

se puede obtener finalmente el número de celdas que se elegirán aleatoriamente en cada  $\Delta t$ :

$$N = \left[ \frac{(\#total\ de\ celdas)\sqrt{2}}{K} \right]^2 \left( \frac{d\rho}{dt} \right)^{1-2m} \quad (6.66)$$

Donde K es un factor que tiene un valor de 6030 [75].

El uso apropiado de estos pasos permite simular la evolución microestructural durante la recristalización, un ejemplo se muestra en la Figura 32 [77].

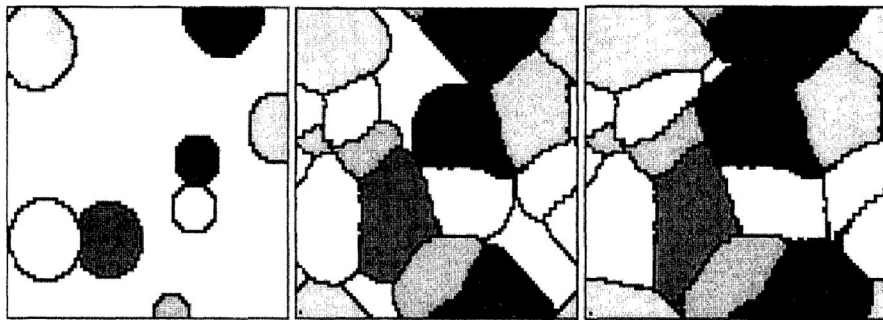


Figura 32.- Secciones consecutivas de una material que está recristalizando. Determinado a partir de una simulación 3D de autómatas celulares. El tamaño de la rejilla es de 200x200x200 puntos [77].

### 6.6.2. Método de Monte Carlo (MC)

Con este método es posible modelar el crecimiento normal de grano, crecimiento anormal de grano y la recristalización. El método de MC utiliza el modelo de Potts [40,77] en el cual, la microestructura se discretiza en redes 2D (cuadrados, hexágonos y triángulos) y en 3D (ver Figura 33). En una red, un sitio se define en función del número de vecinos.

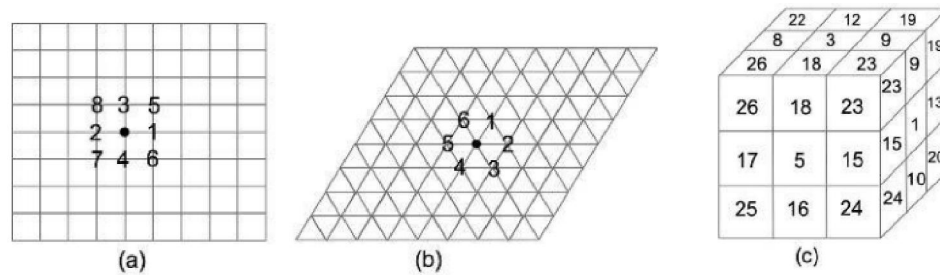


Figura 33.- Diferentes tipos de redes, a) red cuadrada, b) red rectangular, c) red cúbica [77].

A cada sitio de la red se le asigna un número  $s_i$ , el cual corresponde a la orientación específica del cristal del grano en el cual se encuentra. Los sitios de red que están adyacentes a los sitios que tienen diferentes orientaciones son separados mediante una frontera de grano mientras que los sitios rodeados por otros sitios con la misma orientación forman parte del mismo grano. Cada sitio  $s_i$  contribuye a una energía almacenada  $H(s_i)$  en el sistema, la cual en el fenómeno de recristalización representa a la energía almacenada durante la deformación en forma de dislocaciones en el sitio  $i$ . Habrá además una contribución a la energía libre de la frontera de grano,  $J$ , debido a la presencia de pares de vecinos con diferente orientación. Si se suman ambas contribuciones la energía del sistema puede calcularse mediante el siguiente Hamiltoniano [78]:

$$E = \frac{1}{2} \sum_i^n \sum_j^Z J_{s_i} J_{s_j} [1 - \delta_{s_i s_j}] + \sum_i^n H(s_i) \quad (6.67)$$

En la ecuación anterior la sumatoria  $i$  se realiza hasta los  $N$  sitios del sistema y la sumatoria  $j$  sobre los sitios más cercanos de los vecinos y  $\delta_{ij}$  es la delta de Kronecker ( $\delta_{ij}=1$  si  $i=j$ ,  $\delta_{ij}=0$  si  $i \neq j$ ). La reducción de la energía interfacial es la que genera la evolución microestructural. Posteriormente, un generador de número aleatorio elige una celda, cambia el estado de la celda, y se calcula el cambio de energía total  $\Delta E$ . El cambio en energía se acepta o se rechaza dependiendo de una función de probabilidad de

transformación,  $P$ . El método MC se aplica normalmente en términos del algoritmo de Metrópolis, el cual define la probabilidad como:

$$P = \begin{cases} \exp\left(-\frac{\Delta E}{kT}\right) & \text{si } \Delta E > 0 \\ 1 & \text{si } \Delta E \leq 0 \end{cases} \quad (6.68)$$

El término  $kT$  representa a la energía térmica de la simulación. El tiempo requerido para intentar un cambio de orientación ya sea exitoso o no, se define arbitrariamente mediante  $\tau$ . En promedio toma  $N_\tau$  veces visitar cada sitio en la red de la simulación, lo que se define como un intervalo de tiempo de Monte Carlo (MCS). Se pueden aplicar diversas condiciones frontera en el método de Monte Carlo como las que se muestran en la Figura 34. En el caso donde las fronteras representan el borde de un sistema simulado, los sitios tendrán menos vecinos cercanos, o éstos pueden tener asociada una energía superficial sólido/líquido o sólido/gas, o puede haber alguna concentración de soluto los cuales se imponen como una condición frontera (Figura 34a). Otro tipo de condición frontera es la reflectora (Figura 34b). En este caso, los sitios de la frontera son reflejados, de tal manera que en la capa vecina, los sitios de la frontera son aquellos sitios definidos por una transformación de reflexión. En la condición frontera periódica (Figura 34c), los bordes de la simulación se envuelven y hacen contacto con los bordes opuestos. En el caso de la condición periódica de tornillo (Figura 34d), los bordes de la simulación se envuelven, y además se aplica un vector de desplazamiento paralelo a la frontera.

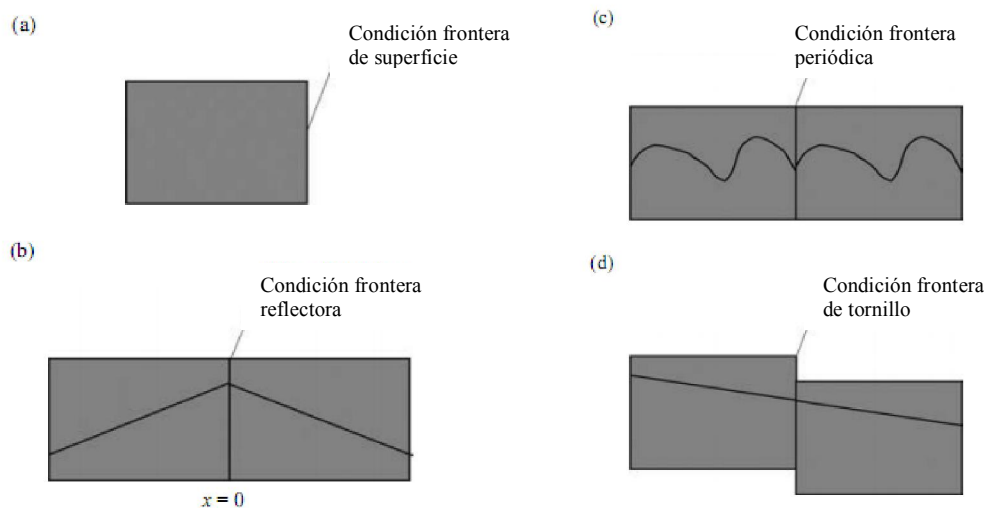


Figura 34.- Condiciones frontera utilizadas en el modelo de Potts: a) superficie, b) simetría, c) periódica y d) de tornillo [40,79]

Al modelar recristalización mediante el método de MC la variable más importante es la energía almacenada y su relación con la microestructura ya que esta determina a la velocidad de nucleación. Una forma de modelar la distribución de energía almacenada en la microestructura es desarrollar simulaciones de deformación plástica e introducir los resultados de dichas simulaciones en el modelo de Potts mediante cantidades escalares  $h_i$ . Después se establece un criterio de nucleación para producir núcleos libres de deformación en la estructura [78,80].

En lo que se refiere al crecimiento de grano, el método de MC se basa en que la migración basada en el cambio de curvatura de los granos provoca la evolución microestructural. Las fronteras que sean cóncavas provocarán que se encojan los granos mientras que las convexas harán que éstos crezcan. Von Neumann [40] estableció una ley la cual establece que la velocidad de crecimiento de una celda 2-D con área  $A$  y lados  $N_s$  está dada por la ecuación (6.69):

$$\frac{dA}{dt} = c(N_s - 6) \quad (6.69)$$

El número 6 en la ecuación anterior representa el número de fronteras por grano para redes en 2D y  $c$  es una constante.

### 6.6.3. Campo de fase

En un modelo de campo de fase, se utilizan una o más variables de campo artificiales. Diferentes valores de las variables de campo distinguen fases y dominios diferentes. Por ejemplo, si se considera un sistema con  $N$  granos  $\phi_1, \phi_2, \dots, \phi_N$ , el campo de fase  $\phi_\alpha$  podría valer 1 dentro del grano  $\alpha$ , 0 dentro de los otros granos, y  $0 < \phi_\alpha < 1$  en las fronteras de grano [81].

A través de las interfases, las variables de campo varían continuamente a partir de un valor uniforme correspondiente a un tipo de la fase a otro valor uniforme correspondiente a otra fase. Por lo tanto, las interfases en un modelo de campo de fase son difusas y poseen cierto espesor.

La variación de una variable de campo a través de una interfase se muestra esquemáticamente en la Figura 35:

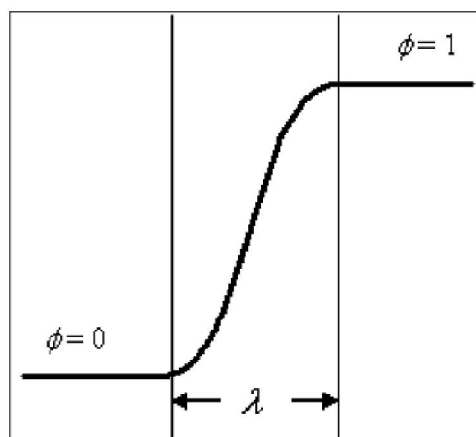


Figura 35.- Comportamiento de una variable de campo [70].

Una forma efectiva de formular la evolución microestructural (cinética del cambio microestructural) es definiendo una energía total del sistema y derivar la cinética en una ruta descendente de la energía total. La energía puede representarse mediante la ecuación (6.70):

$$F = F[\phi(r, t)] \quad (6.70)$$

donde  $r$  es un vector de posición y  $t$  el tiempo. Dado que  $\phi$  es en sí una función, por lo tanto,  $F$  sería un funcional de energía libre cuyas derivadas se obtienen con la ayuda del cálculo variacional [40].

En el método de campo de fase, la termodinámica de una microestructura heterogénea se describe mediante la teoría de interfase difusa (diffuse-interface) de Cahn y Hilliard [40]. De acuerdo a esta teoría, para un sistema descrito mediante un campo de composición, la energía libre local  $f$ , de un sistema heterogéneo depende no solamente de la composición local  $c$ , sino también de los gradientes de composición. Truncando en segundo orden en la expansión de la energía libre en términos de los gradientes de composición con respecto a una composición uniforme, la energía libre química total de un sistema con volumen  $V$  está dada por:

$$F = \int \left[ f(c) + \frac{\alpha}{2} (\nabla c)^2 \right] dV \quad (6.71)$$

donde  $\alpha$  es el coeficiente energético de gradiente de composición.  $\alpha$  caracteriza el costo energético debido a la heterogeneidad del campo en las interfases, es decir, la contribución de la energía interfacial a la energía libre total. El término de gradiente de energía es cero dentro de una fase o dominio donde la composición es uniforme, y diferente de cero a través de las interfases donde varían los campos de composición. Por lo tanto, la ecuación anterior representa la energía libre química total de una microestructura incluyendo la energía libre volumétrica así como la energía libre en exceso asociada con todas las interfases de la microestructura.

Para un sistema heterogéneo general si se tiene una variable de campo descrita por un conjunto de campos conservativos,  $c_i$  (por ejemplo: la concentración, la densidad, volumen molar en sistemas multicomponentes), y un conjunto de campos no conservativos,  $\eta_i$  (por ejemplo: ordenamiento atómico, deformación plástica para las dislocaciones, magnetización), la energía libre total se puede escribir como [82]:

$$F = \int \left[ f(c_1, c_2, \dots, c_n, \eta_1, \eta_2, \dots, \eta_p) + \sum_{i=1}^n \alpha_i (\nabla c_i)^2 + \sum_{i=1}^3 \sum_{j=1}^3 \sum_{k=1}^p \beta_{ij} \nabla_i \eta_k \nabla_j \eta_k \right] dV + \iint G(r-r') dV dV' \quad (6.72)$$

donde  $f$  es la densidad de energía libre local en función de todas las variables de campo,  $\alpha_i$  y  $\beta_i$  son los coeficientes de los gradientes de energía. La segunda integral doble representa las contribuciones de interacciones por pares, no locales, de largo rango [ $G(r-r')$ ] tales como las interacciones elásticas, electrostáticas y magnéticas entre los elementos volumétricos  $dV$  y  $dV'$ .

En todos los modelos de campo de fase, la evolución espacial y temporal de las variables de campo sigue el mismo conjunto de ecuaciones cinéticas. Todos los campos conservativos, evolucionan con el tiempo de acuerdo a la ecuación de Cahn-Hilliard, o simplemente la ecuación de difusión en el caso de que no se introduzca un gradiente de energía para la variable conservativa, mientras que para los campos no conservativos, están gobernados por la ecuación de Allen-Cahn [82]:

$$\frac{\partial c_i(r,t)}{\partial t} = \nabla M_{ij} \nabla \frac{\delta F}{\delta c_j(r,t)} \quad (6.73)$$

$$\frac{\partial \eta_p(r,t)}{\partial t} = -L_{pq} \frac{\delta F}{\delta \eta_q(r,t)} \quad (6.74)$$



donde  $M_{ij}$  y  $L_{pq}$  están relacionados a la movilidad atómica o interfacial.  $F$  es la energía libre total de un sistema, el cual es un funcional de todos los campos relevantes conservativos y no conservativos.

Resolviendo numéricamente los sistemas de ecuaciones de Cahn-Hilliard y de Allen-Cahn sujetas a condiciones iniciales y de frontera apropiadas, se puede obtener la evolución de la microestructura. La malla puede estar compuesta de elementos cuadrados o elementos triangulares [41], aunque la mayoría de las simulaciones de campo de fase emplean discretización de diferencias finitas de segundo orden en el espacio utilizando rejillas uniformes y el método de Euler hacia delante para el avance en tiempo (método explícito). Se puede obtener un ahorro dramático en tiempo de computación y mejora en la precisión numérica utilizando métodos más avanzados como el método espectral de Fourier semi-implícito y MEF con malla adaptativa [82].

El método de campo de fase ofrece un número de ventajas. Con éste método se puede modelar la evolución de morfologías arbitrarias y microestructuras complejas sin rastrear explícitamente las posiciones de la interfase. Puede ser aplicado a todos los tipos de problemas de microestructura si se eligen apropiadamente las variables de campo físicas o artificiales. Puede describir diferentes procesos tales como las transformaciones de fase (debido a la reducción de energía libre volumétrica) y engrosamiento de partículas (debido a la reducción de la energía interfacial) dentro de la misma formulación. Es sencillo incorporar el efecto de la coherencia y esfuerzos aplicados así como campos eléctricos y magnéticos. Es posible ligar los modelos de campo de fase a bases de datos termodinámicas y cinéticas para obtener los parámetros de los materiales.

# CAPÍTULO 7

## EXPERIMENTACIÓN NUMÉRICA

### 7.1. Introducción

En el presente trabajo se estudian los efectos metalúrgicos y de procesamiento sobre la microestructura final del acero eléctrico por lo cual se generaron modelos de pruebas de compresión en frío y de laminación en caliente.

Se realizaron simulaciones termomecánicas utilizando el paquete comercial DEFORM el cual es un sistema para simulación de procesos basado en el método de

elemento finito diseñado para modelar numéricamente procesos de formado y tratamientos térmicos utilizados en el formado de metales. Dicho paquete también incluye un módulo de microestructura donde se emplea el método AC.

Un componente clave en DEFORM es que cuenta con un sistema de remallado automático y optimizado capaz de resolver problemas que involucran grandes deformaciones. Dicho programa permite realizar modelos acoplados de deformación y de transferencia de calor para la simulación de procesos de forja en caliente y en frío (análisis termomecánicos). Además cuenta con una base de datos para aleaciones como aceros, aluminios, titanio y superaleaciones. Se pueden incluir materiales por parte del usuario los cuales pueden tener comportamiento rígido, elástico e inelástico. Se pueden asignar cargas de forjado, esfuerzos en los dados, flujo de los granos, formación de defectos y fractura dúctil. Por otro lado, permite observar contornos gráficos para temperatura, deformación, esfuerzo, daño, entre otras variables los cuales simplifican el análisis durante el post-procesamiento. Además cuenta con un módulo especial de microestructura que utiliza el método de autómatas celulares para conectar la escala macro a la escala meso que permite calcular la evolución microestructural y de tamaño de grano.

## 7.2. Compresión en frío

Se generaron modelos basados en las pruebas experimentales de la referencia [85] que consisten en una compresión en frío en condiciones de deformación plana considerando reducciones de 10, 35 y 70% seguidas de un calentamiento a una temperatura de 800°C por 10 minutos. La Tabla 7.1 muestra la composición química del acero eléctrico considerado, llamado material A1 (el cual contiene 2.7% de silicio), para los modelos de compresión en frío.

Tabla 7.1. Composición química del acero considerado para la simulación de compresión en frío [85].

Material	%C	%Si	%Al	%Mn	%P	%S	%N
A1	0.003	2.74	0.087	0.047	0.015	0.009	0.007

Se generó una geometría rectangular en 2D con dimensiones de 30 mm de largo, por 5.5 mm de altura. La pieza de acero al silicio fue discretizada con 2944 elementos. Los herramientas fueron modelados como cuerpos rígidos. La velocidad de desplazamiento es de 30 mm/s. La Figura 36 muestra el modelo generado en DEFORM 2D.

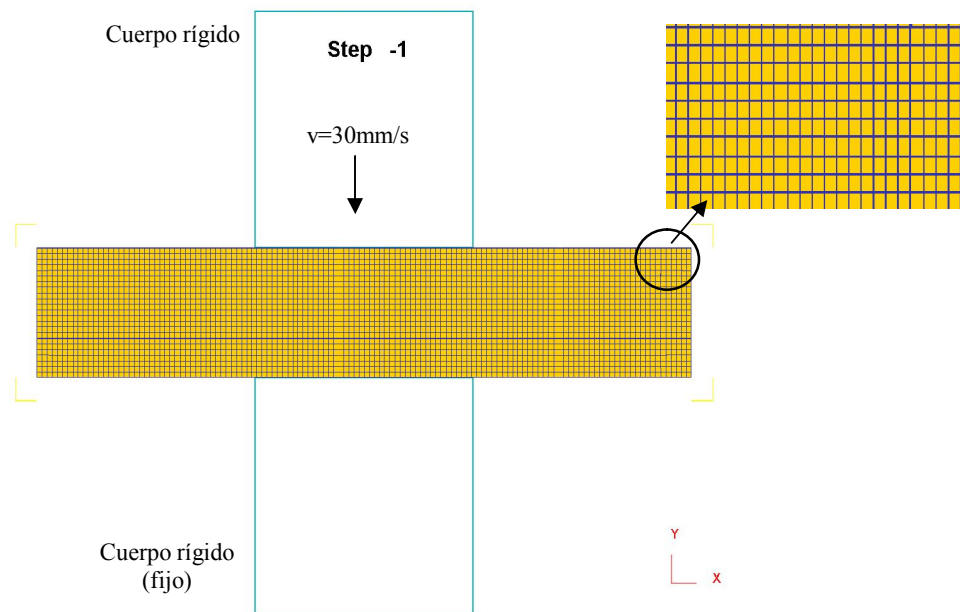


Figura 36.- Modelo de compresión generado en DEFORM 2D.

### 7.2.1. Propiedades mecánicas para el modelo de compresión en frío

Se utilizó el modelo de Hollomon para el modelado de la curva esfuerzo-deformación, ecuación (7.1):

$$\sigma = K \varepsilon^n \quad (7.1)$$

Para el material A1,  $K=850.68$  MPa y  $n=0.0835$  [85]. La Figura 37 muestra la curva esfuerzo-deformación verdadera para este material.

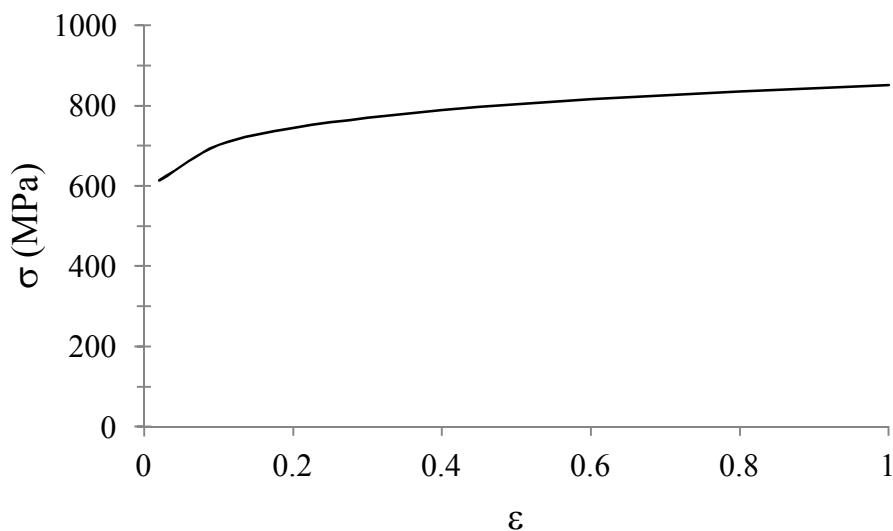


Figura 37.- Curva esfuerzo deformación verdadera para el material A1, reproducido de [70].

### 7.2.2. Evolución microestructural mediante el modelo JMAK

Se procedió a calcular la evolución microestructural durante el calentamiento considerando una recristalización estática. La Tabla 7.2 muestra los coeficientes considerados para la ecuación (5.19) en función de la reducción [85].

Tabla 7.2. Coeficientes de la ecuación (5.19).

% reducción	$n$	$\ln(k)$
10	0.588	-7.91
35	0.797	-6.18
70	1.892	-11.51

La Tabla 7.3 muestra los coeficientes considerados para la ecuación (5.51) para el cálculo del tamaño de grano recristalizado [86,87].

Tabla 7.3. Coeficientes de la ecuación (5.51).

$a_n$	$h_L$	$n_L$	$m_L$	$Q_n$	$c_n$
0.5	0.67	-0.67	0	0	0

La Tabla 7.4 muestra los coeficientes considerados para la ecuación (5.54) para considerar el crecimiento de grano [85,86].

Tabla 7.4. Coeficientes de la ecuación (5.54).

$m$	$a_g$	$Q_g$
4.2	4.1	225,000

### 7.2.3. Evolución microestructural mediante autómatas celulares

Las Figura 38 muestra las microestructura inicial para el material A1 modelada en DEFORM 2D mediante autómatas celulares. El tamaño inicial de grano es de 200  $\mu\text{m}$  [85].

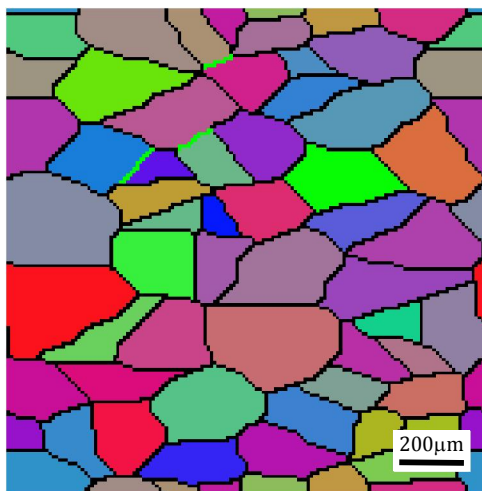


Figura 38.- Microestructura inicial para el material A1 modelado en DEFORM 2D.

Se calcularon los valores de  $h_o$  y  $r_o$  utilizando las ecuaciones (6.57) y (6.58) considerando una energía de activación de 225 KJ/mol [85], y los valores resultantes

fueron de 0.02269 y 1346.02, respectivamente. La Tabla 7.5 muestra los coeficientes de las ecuaciones (6.57) y (6.58):

Tabla 7.5. Coeficientes de las ecuaciones (6.57) y (6.58), [40,54].

$\varepsilon_o$	$Q_h$	$Q_r$	$h_o$	$r_o$	$m_h$	$m_r$	$K$
1	225000	225000	0.02269	1346.023	0.2	0.2	6030

La Tabla 7.6 muestra los coeficientes de ecuación (6.59) para el material A1:

Tabla 7.6. Coeficientes de la ecuación (6.59) [40,53,71].

$G$ (GPa)	$b$ (m)	$A$	$\alpha_1$	$\alpha_2$	$\alpha_3$
80	$2.52 \times 10^{-10}$	-	1	0.1	-

### 7.3. Laminado en caliente

Se generaron modelos de laminación en caliente a 1100°C en 2 aceros al silicio. El primero es un acero al silicio con 2 fases: ferrita y un porcentaje de austenita (16%, llamado material A2) y el segundo es un acero al silicio con una sola fase, ferrita, (llamado material A3). Los modelos de laminación en caliente se hicieron mediante las siguientes suposiciones que ayudaron a reducir el costo computacional:

1. Se considera un modelo en 2 dimensiones.
2. Se consideran condiciones de deformación plana.
3. Se considera simetría.
4. El rodillo se considera como un cuerpo rígido.

Las dimensiones del planchón son de 150 mm de largo por 30 mm de espesor. La composición química de los materiales A2 y A3 se muestran en la Tabla 7.7.

Tabla 7.7. Composición química de los materiales A2 y A3 [5,53,54,87,88].

Material	C	Si	Mn	Cr	Ni	Al	S	P	Cu
A2	0.036	3.16	0.089	0.008	0.011	0.003	0.019	0.004	0.018
A3	0.006	2.99	0.036	0.014	0.016	0.003	0.005	0.002	0.006

### 7.3.1. Propiedades mecánicas y térmicas para los modelos de laminación en caliente

El esfuerzo de fluencia,  $\sigma$ , se obtuvo mediante las ecuaciones (7.2) a la (7.4), [5]:

$$\sigma = 0.8\sigma_s + 0.2\sigma_s \left[ 1 - \exp\left(-\frac{\varepsilon}{\varepsilon_r}\right) \right]^{1/2} \quad (7.2)$$

$$\sigma_s = 0.155 \left[ 1 + 7.5 \times 10^{-3} (\% \gamma) \right] Z^{0.192} \quad (7.3)$$

En las ecuaciones (7.2) a la (7.3),  $\sigma_s$  es un esfuerzo de fluencia en estado estable,  $\varepsilon_r$  es una deformación de relajación (relaxation strain) relacionada con el esfuerzo en estado estable mediante la ecuación (7.4):

$$\varepsilon_r = 0.08 + 1 \times 10^{-5} \sigma_s^2 \quad (7.4)$$

Z es el parámetro de Zener Hollomon y el  $\% \gamma$  representa la cantidad de austenita presente la cual puede obtenerse mediante la Figura 21. La Figuras 39 a la 41 muestran las curvas esfuerzo-deformación en función de la temperatura, velocidad de deformación y diferentes contenidos de austenita.



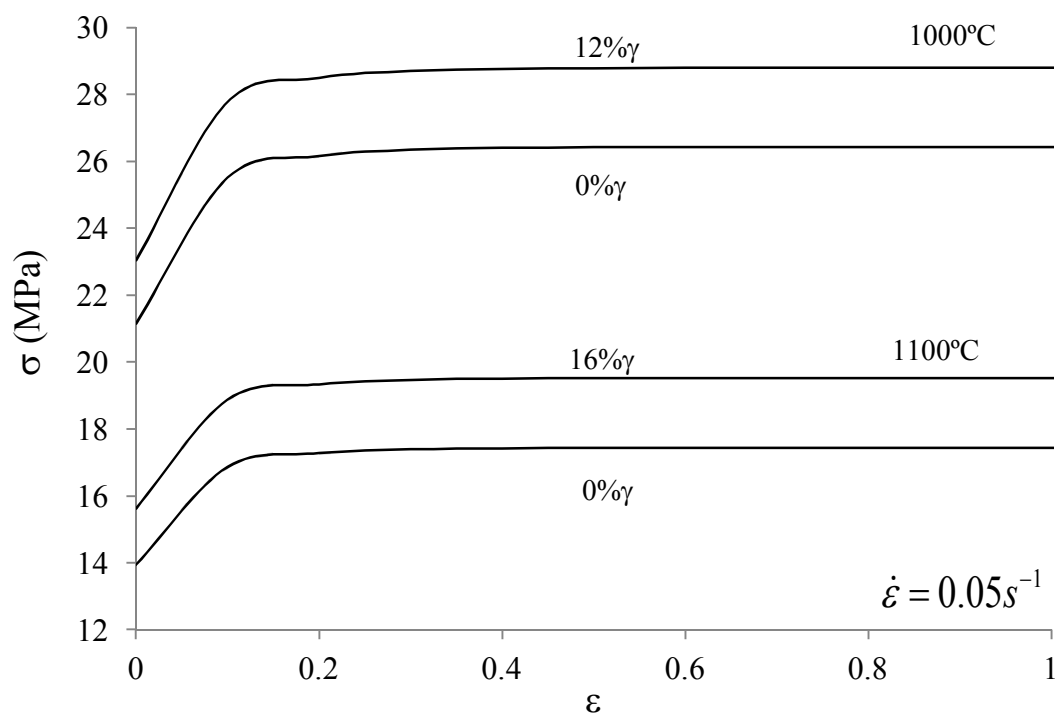


Figura 39.- Curvas esfuerzo-deformación verdadera a diferentes temperaturas y una velocidad de deformación de  $0.05s^{-1}$  en función del contenido de austenita.

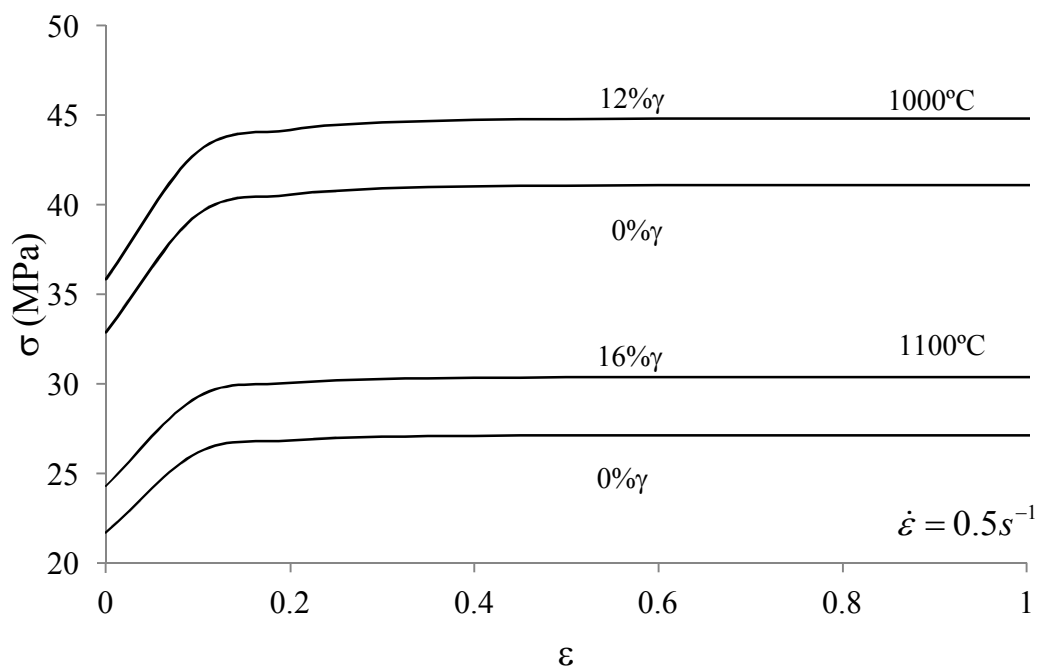


Figura 40.- Curvas esfuerzo-deformación verdadera a diferentes temperaturas y una velocidad de deformación de  $0.5s^{-1}$  en función del contenido de austenita.

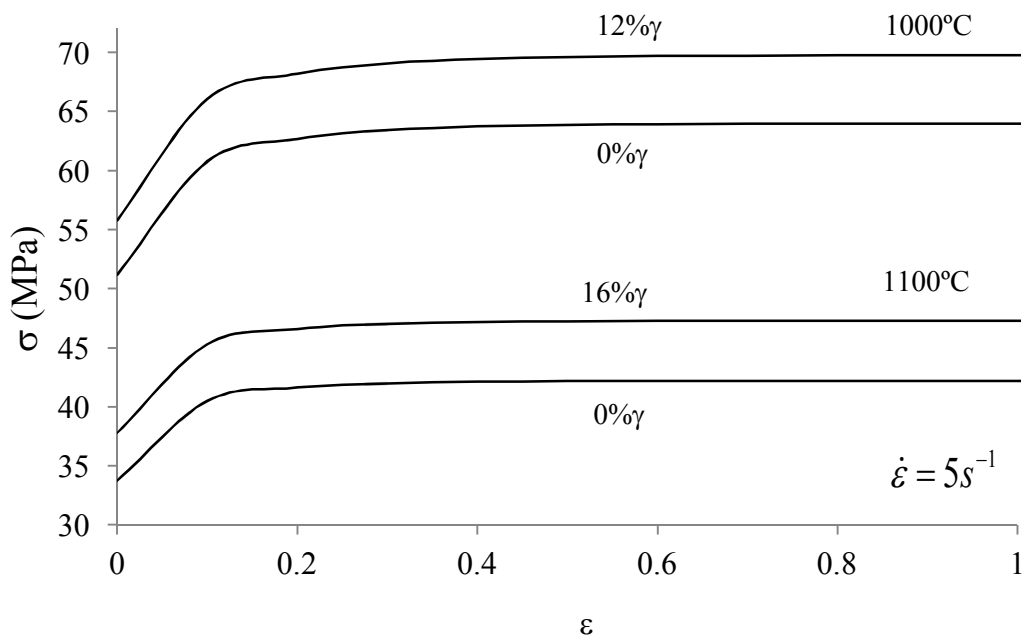


Figura 41.- Curvas esfuerzo-deformación verdadera a diferentes temperaturas y una velocidad de deformación de  $5 \text{ s}^{-1}$  en función del contenido de austenita.

Las Figuras 42a) y 42b) muestran las curvas  $2\sigma d\sigma/d\epsilon$  vs  $\sigma^2$  en función del contenido de austenita.

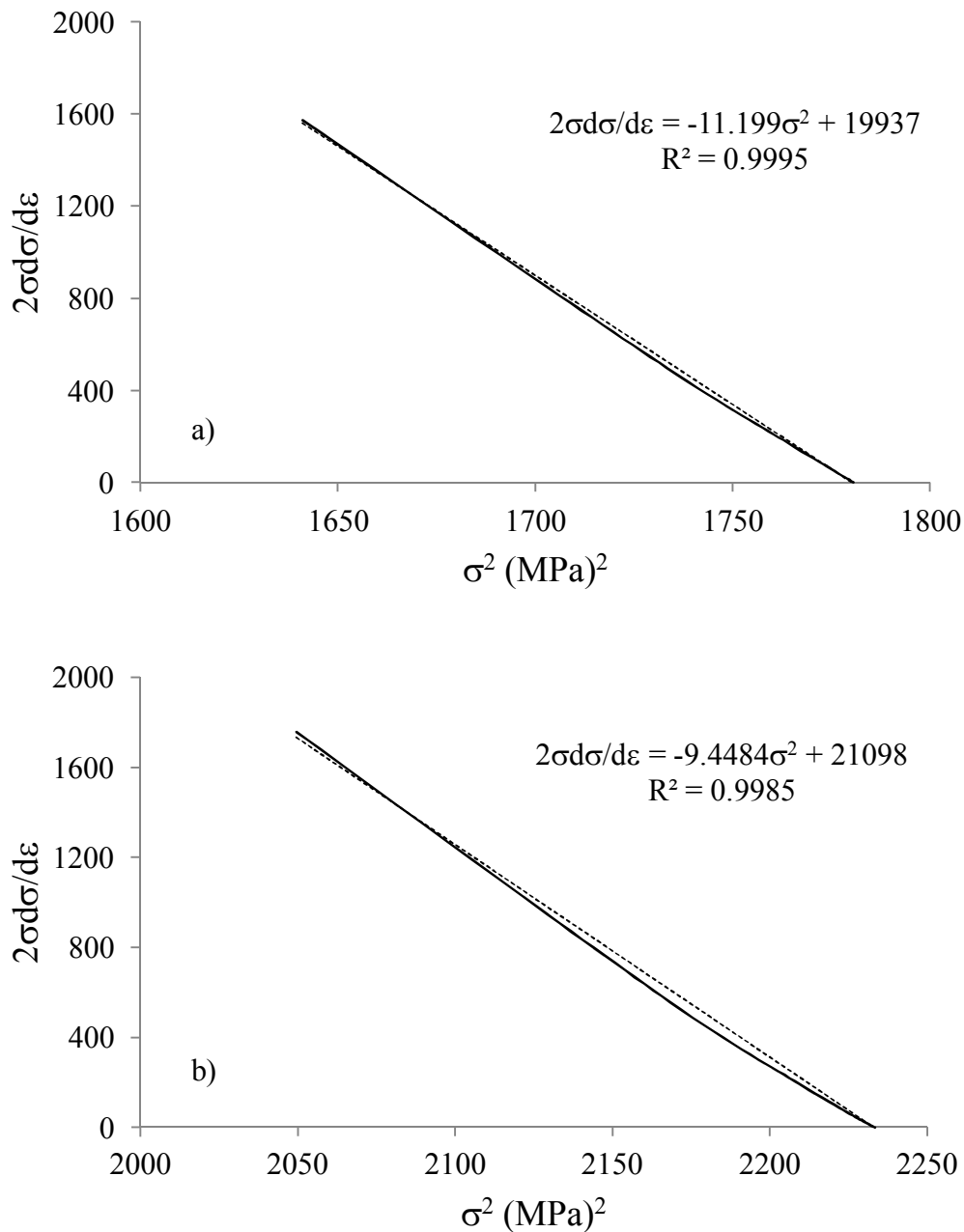


Figura 42.- Curvas  $2\sigma d\sigma/d\varepsilon$  vs  $\sigma^2$  para aceros con 3% Si con diferentes contenidos de austenita a  $1100^\circ\text{C}$  y  $\dot{\varepsilon} = 5\text{s}^{-1}$ :  
a) 0% $\gamma$ , b) 16% $\gamma$ .

La Tabla 7.8 muestra las propiedades térmicas consideradas para el análisis termomecánico.

Tabla 7.8. Propiedades térmicas consideradas [86].

$k$ (W/m $^\circ\text{C}$ )	$\rho$ (Kg/m $^3$ )	$C_p$ (J/Kg $^\circ\text{C}$ )
27.5	7800	860.5

### 7.3.2. Modelo termomecánico

#### 7.3.2.1. Acero eléctrico con 2 fases (material A2)

Para este acero se modela un proceso de laminación de 2 pases, cada uno con un 30% de reducción seguido de un calentamiento a 1100 °C por 2 minutos. Lo que dará un espesor final de 21 mm después del primer pase y 14.7 mm después del segundo pase. El diámetro del rodillo tiene un valor de 136 mm con una velocidad en la periferia de 222 mm/s [54]. Para ambos pases, en la zona de contacto entre el rodillo y el planchón se consideró un coeficiente de fricción ( $\mu$ ) de 0.7 y un coeficiente de transferencia de calor de 5000 W/m<sup>2</sup>°C los cuales son valores predefinidos en el paquete comercial DEFORM [71]. La Figura 43 muestra la secuencia de simulación:

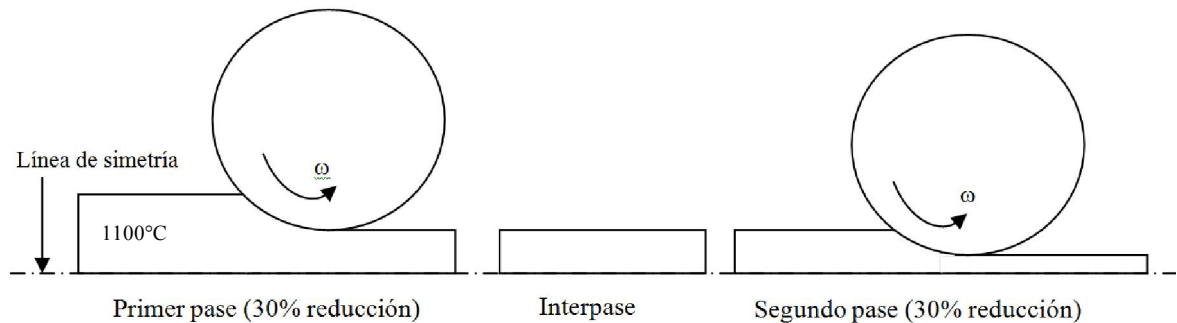


Figura 43.- Pases de simulación.

El modelo discretizado en DEFORM en 2D se muestra en la Figura 44. El mallado del planchón consiste de 1000 elementos. Se modeló también un empujador (pusher) rígido que permitirá poner en contacto el planchón con el rodillo.

Para el interpase se considera un tiempo de transición de 15 segundos al moverse el planchón del pase 1 al pase 2 [53].

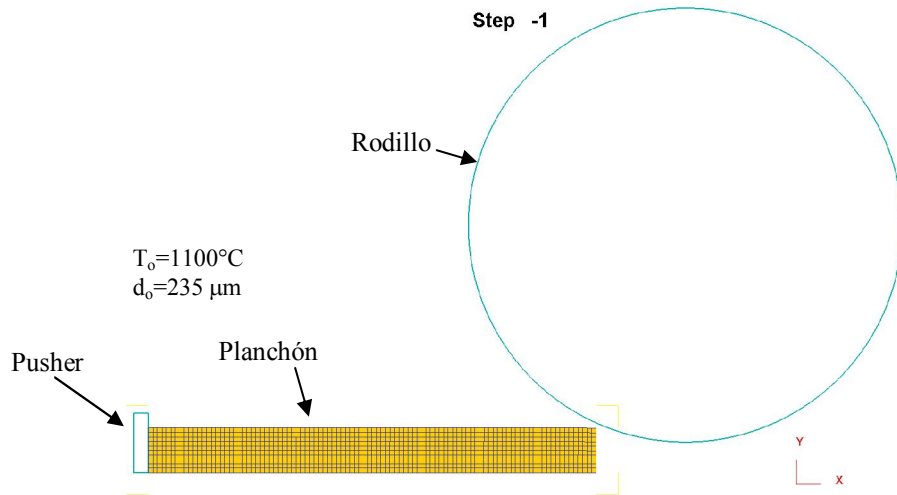


Figura 44.- Modelo 2D generado en DEFORM para el primer pase de laminación.

En el interpase, se consideró enfriamiento por convección natural al aire y pérdida de calor de radiación con un coeficiente de emisividad de 0.8. El flujo de calor por convección se obtiene con la ecuación (6.4). Se obtuvo una estimación del coeficiente de transferencia de calor para una placa horizontal [59]. Para realizar el cálculo primeramente se calculó un número de Rayleigh, ecuación (7.5):

$$Ra = \frac{g\beta(T_s - T_\alpha)L_c^3}{\nu^2} Pr \quad (7.5)$$

De la ecuación anterior  $g$  es la gravedad,  $\beta=1/(T_s+T_\alpha)$ ,  $T_s$  es la temperatura de la superficie,  $T_\alpha$  es la temperatura ambiente,  $Pr$  el número de Prandtl,  $L_c$  representa a la relación entre el área de la superficie y su perímetro y  $\nu$  la viscosidad cinemática. Si se considera una temperatura ambiente de 30°C el número de Prandtl tiene un valor de 0.7282 para el aire y la viscosidad cinemática que tiene un valor de  $1.608 \times 10^{-5} \text{ m}^2/\text{s}$  [59]. Una vez obtenido el número de Rayleigh se procede a calcular el número de Nusselt con la ecuación (7.6):

$$Nu = 0.54Ra^{1/4} \quad (7.6)$$

Finalmente se determinó el coeficiente de transferencia de calor mediante la ecuación (7.7) en la que  $k$  es la conductividad térmica del aire que tiene un valor de  $0.02588\text{W/m}^\circ\text{C}$  [59]:

$$h = \frac{k}{L_c} Nu \quad (7.7)$$

Sustituyendo valores en las ecuaciones (7.5) a (7.7) se obtuvo un coeficiente de transferencia de calor de  $9.028\text{ W/m}^2\text{C}$ . Una vez obtenidos los resultados de deformación y temperatura se procedió al análisis de evolución microestructural.

#### 7.3.2.2. Acero eléctrico ferrítico (material A3)

Se ha aceptado generalmente que la recuperación domina al proceso de restauración de un acero al silicio ferrítico a altas temperaturas. Como se mencionó en la sección 4.4, un acero eléctrico totalmente ferrítico solo presentará una recuperación dinámica durante la deformación.

Se modeló un acero totalmente ferrítico con un tamaño inicial de grano de  $180\ \mu\text{m}$  [54]. Se simuló un pase con 20% de reducción seguido de un calentamiento a  $1100^\circ\text{C}$  por 20 minutos.

#### 7.3.3. Modelo microestructural mediante el modelo JMAK

##### 7.3.3.1. Acero eléctrico con 2 fases (material A2)

El material A2, recibió previamente un tratamiento de descarburizado lo cual resultó en diferentes contenidos de carbono a través de su espesor [5,53,54], resultando en diferentes contenidos de austenita, ver Figura 21. Por lo tanto, se consideró un material con 2 porcentajes diferentes de austenita ya que ambas regiones presentan cinéticas de recristalización estática diferentes [53,85]. Dicha distribución se presenta en la Figura

45, lo cual permitirá evaluar la influencia de la austenita en la recristalización final del acero eléctrico. El tamaño inicial de grano es de  $235\mu\text{m}$ .

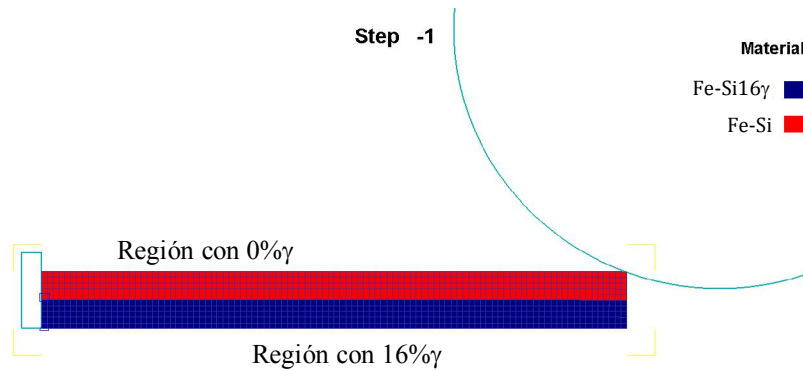


Figura 45.- Material A2 con diferentes contenidos de austenita.

Para determinar la cinética de recristalización estática se calcularon los coeficientes del modelo JMAK de la ecuación (5.19) para ambas regiones a partir de los resultados experimentales de la referencia [5], los resultados se muestran en la Tabla 7.9.

Tabla 7.9. Coeficientes de la ecuación (5.19) calculados de la referencia [5].

Región	$k$	$n$
0% $\gamma$	0.044	0.9595
16% $\gamma$	0.1237	0.9914

Se procedió a obtener los coeficientes de la ecuación (5.51) para calcular el tamaño de grano recristalizado en cada una de las regiones consideradas. La Tabla 7.10 muestra los coeficientes calculados a partir de los datos experimentales de las referencias [53] y [54] mediante análisis de regresión (ver Figura 46).

Tabla 7.10. Coeficientes de la ecuación (5.51) calculados de las referencias [53] y [54].

Región	$a_n$	$h_L$	$n_L$	$m_L$	$Q_n$	$c_n$
0% $\gamma$	330	0.4952	0	0	-34400	0
16% $\gamma$	492	0.2687	0	0	-30600	0

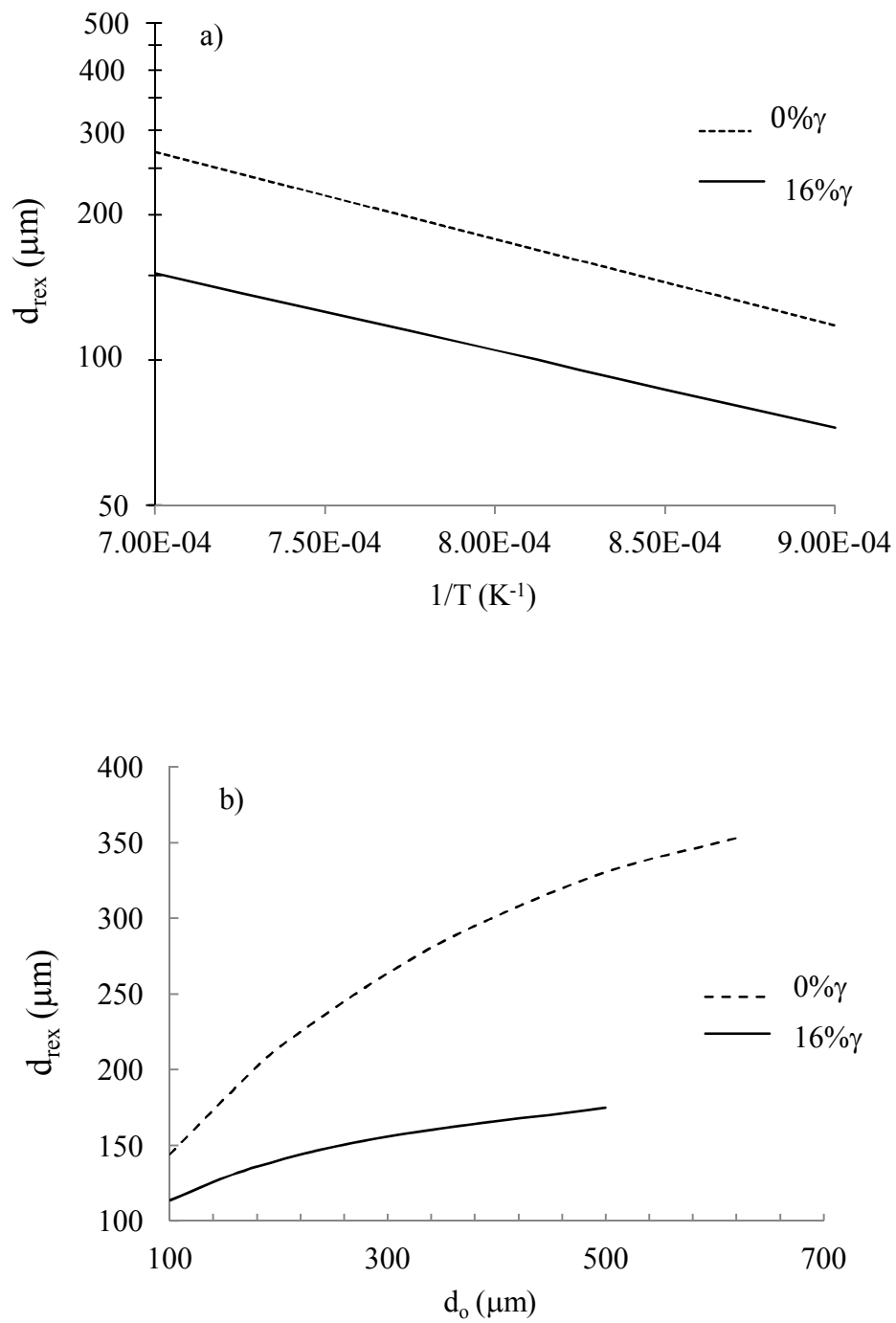


Figura 46.- Tamaño de grano recristalizado para el material A2 en función de: a) Temperatura y b) Tamaño inicial de grano, reproducidas de las referencias [53] y [54].



### 7.3.3.2. Acero eléctrico ferrítico (material A3)

La Tabla 7.11 muestra los coeficientes utilizados para la ecuación (5.19);  $k'$  se calculó utilizando la ecuación (5.20) y el exponente de JMAK se calculó utilizando los datos experimentales de la referencia [87]. El procedimiento de cálculo fue basado en las referencias [86] y [89].

Tabla 7.11. Coeficientes de la ecuación (5.19) para un acero ferrítico (material A3).

$k'$	$n$
0.693	0.9869

Las Figuras 47a) y 47b) muestran la dependencia del tiempo para una transformación del 30% ( $t_{0.3}$ ) con la temperatura y la deformación. De éstas figuras se calculó el exponente de la deformación y la energía de activación mediante un análisis de regresión, después se obtuvo una ecuación para el tiempo de 50% de transformación, ecuación (7.8):

$$t_{0.5} = 7.686 \times 10^{-9} \varepsilon^{-1.941} \exp\left(\frac{230000}{RT}\right) \quad (7.8)$$

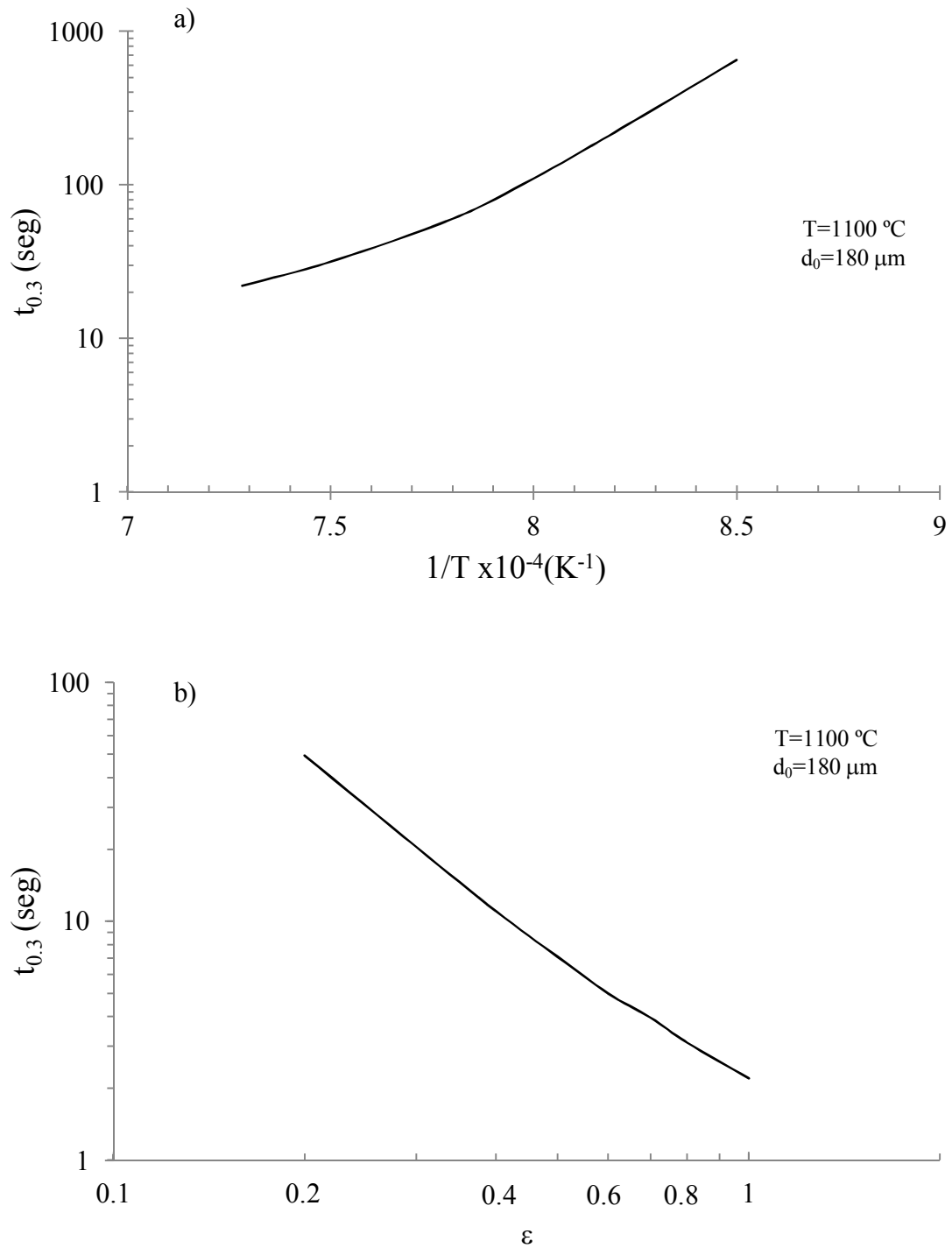


Figura 47.- Dependencia del tiempo para un 30% de transformación para el material A3 en función de: a) temperatura y b) deformación verdadera, reproducidas de la referencia [54].

La Tabla 7.12 muestra los coeficientes introducidos en el programa DEFORM para el cálculo del tiempo de transformación  $t_{0.5}$ .

Tabla 7.12. Coeficientes de la ecuación (5.30) para el material A3.

$A$	$p$	$q$	$r$	$Q_{SRX}$
$7.686 \times 10^{-9}$	1.941	0	0	230000

Se procedió a obtener una ecuación para calcular el tamaño de grano recristalizado, las Figuras 48a) y 48b) muestran la dependencia este tamaño en función de la temperatura y la deformación.

De las Figuras 48a) y 48b) se obtuvo la ecuación (7.9) mediante un análisis de regresión:

$$d_{rex} = 3457 \varepsilon^{-0.766} \exp\left(-\frac{34000}{RT}\right) \quad (7.9)$$

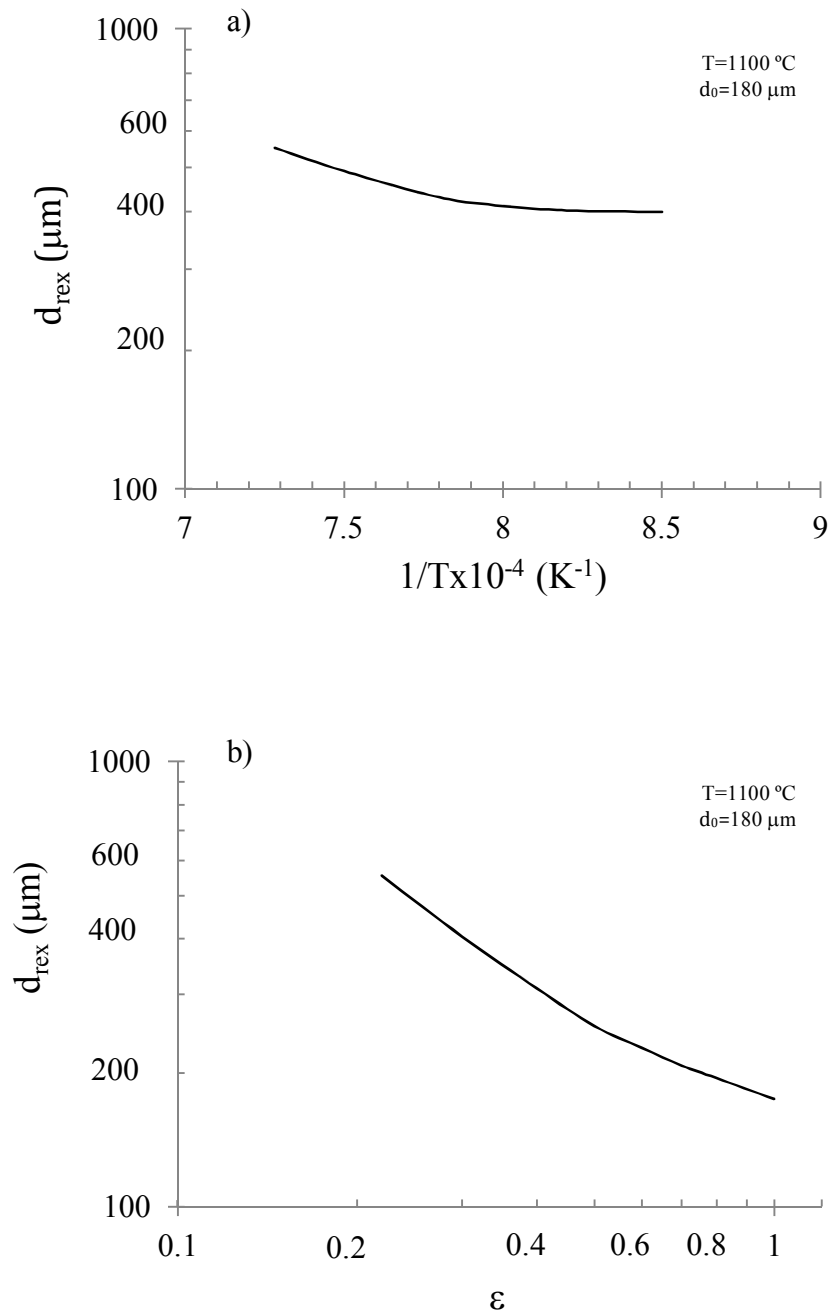


Figura 48.- Dependencia del tamaño de grano recristalizado para el material A3 en función de: a) temperatura y b) deformación verdadera, reproducidas de la referencia [54].

La Tabla 7.13 muestra los coeficientes introducidos en el programa DEFORM para el cálculo del tamaño de grano recristalizado.

Tabla 7.13. Coeficientes de la ecuación (5.51).

$a_n$	$h_L$	$n_L$	$m_L$	$Q_n$	$c_n$
3457	0	-0.766	0	-34000	0

#### 7.3.4. Modelo microestructural mediante autómatas celulares

Se han publicado numerosos modelos fenomenológicos en el área del modelado de los granos y existen controversias sobre las definiciones de los mecanismos de recrystalización. Para acomodar estos modelos, DEFORM ha escogido las definiciones más comunes y las formas de ecuación generalizadas. En cada escalón de tiempo, se determina la temperatura local, la velocidad de deformación, la deformación y el historial evolutivo del mecanismo se determinan y luego se calculan y actualizan las variables correspondientes a los granos.

##### 7.3.4.1. Acero eléctrico con 2 fases (material A2)

La Figura 49 muestra la microestructura inicial modelada en DEFORM para el acero con diferentes contenidos de austenita. Se estableció un tamaño de grano inicial de 235  $\mu\text{m}$  [53].

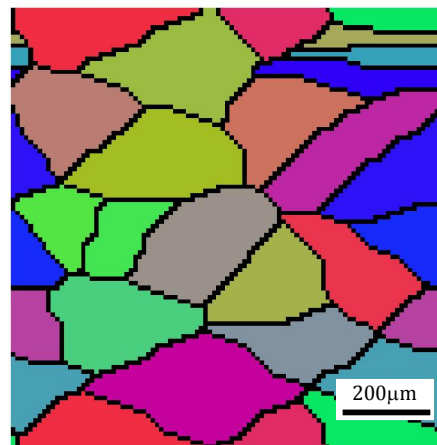


Figura 49.- Microestructura inicial para el material A2.

La Tabla 7.14 muestra los coeficientes utilizados para las ecuaciones (6.54) a la (6.56). Los valores de  $h_o$  y  $r_o$  se calcularon a partir de las curvas de la Figura 42 mediante el procedimiento descrito en la sección 6.6.1.

Tabla 7.14. Coeficientes de las ecuaciones (6.57) y (6.58) [40,54].

$\% \gamma$	$\dot{\epsilon}_o$	$Q_h$	$Q_r$	$h_o$	$r_o$	$m_h$	$m_r$
0	1	315000	315000	$1.321 \times 10^{-7}$	3965.08	0.2	0.2
16	1	315000	315000	$1.398 \times 10^{-7}$	3257.57	0.2	0.2

#### 7.3.4.2. Acero eléctrico ferrítico (material A3)

Para este acero se estableció un tamaño de grano inicial de 180  $\mu\text{m}$  [54]. La microestructura inicial se muestra en la Figura 50.

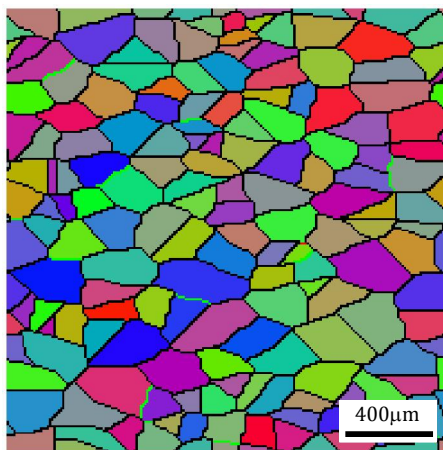


Figura 50.- Microestructura inicial para el material A3.

La Tabla 7.15 muestra los coeficientes de las ecuaciones (6.59) y (6.60). Estos valores se utilizaron para los 2 aceros considerados [40,53].

Tabla 7.15. Coeficientes de las ecuaciones (6.59) y (6.60).

$G$ (GPa)	$b$ (m)	$A$	$\alpha_1$	$\alpha_2$	$\alpha_3$
80	$2.52 \times 10^{-10}$	0	1	0	4

Una vez asignados todos los parámetros, DEFORM determina el número de núcleos mediante la ecuación (6.66).

# CAPÍTULO 8

## RESULTADOS

### 8.1. Introducción

A continuación se muestran los resultados obtenidos del análisis termo-mecánico de los aceros estudiados mediante el método de elemento finito y de la evolución microestructural calculada utilizando los modelos JMAK y AC. Se realizó una comparación de los tamaños de grano recristalizado calculados con ambas técnicas lo que permitió hacer una predicción de sus propiedades magnéticas.



## 8.2. Resultados de la compresión en frío para el material A1

### 8.2.1. Deformación y temperatura

Para los resultados de las Figuras 51 a la 53 se utilizaron 100 incrementos de análisis controlados por desplazamiento, es decir, que la herramienta superior se desplaza cada incremento un valor  $d/100$ , donde  $d$  es el desplazamiento total para la reducción deseada.

Las Figura 51 muestra la distribución de temperaturas al final de las pruebas de compresión en frío con diferentes reducciones para el material A1. En la Figura 51a) a una reducción del 10%, el modelo presentó una temperatura máxima de 52.2°C en la superficie mientras que en el centro se encuentra en un rango de 25 a 40°C. En la Figura 51b) con una reducción del 35% se alcanzó una temperatura máxima de 101°C mientras que en la Figura 51c) que corresponde a una reducción del 70% se alcanzó un valor máximo de 184°C.

La Tabla 8.1 muestra las temperaturas máximas después de la compresión en frío en función de la reducción.

Tabla 8.1.- Temperaturas máximas en función de la reducción para los modelos de compresión en frío.

% reducción	Temperatura máxima (°C)
10	52.2
35	101
70	184

Estos valores confirman que al aumentar la cantidad de reducción aumenta la temperatura de la muestra analizada. Este comportamiento está asociado a la distribución de deformación verdadera (ver Figura 52), en la que se observan zonas de mayor deformación que se relacionan con la temperatura debido a la energía de deformación.

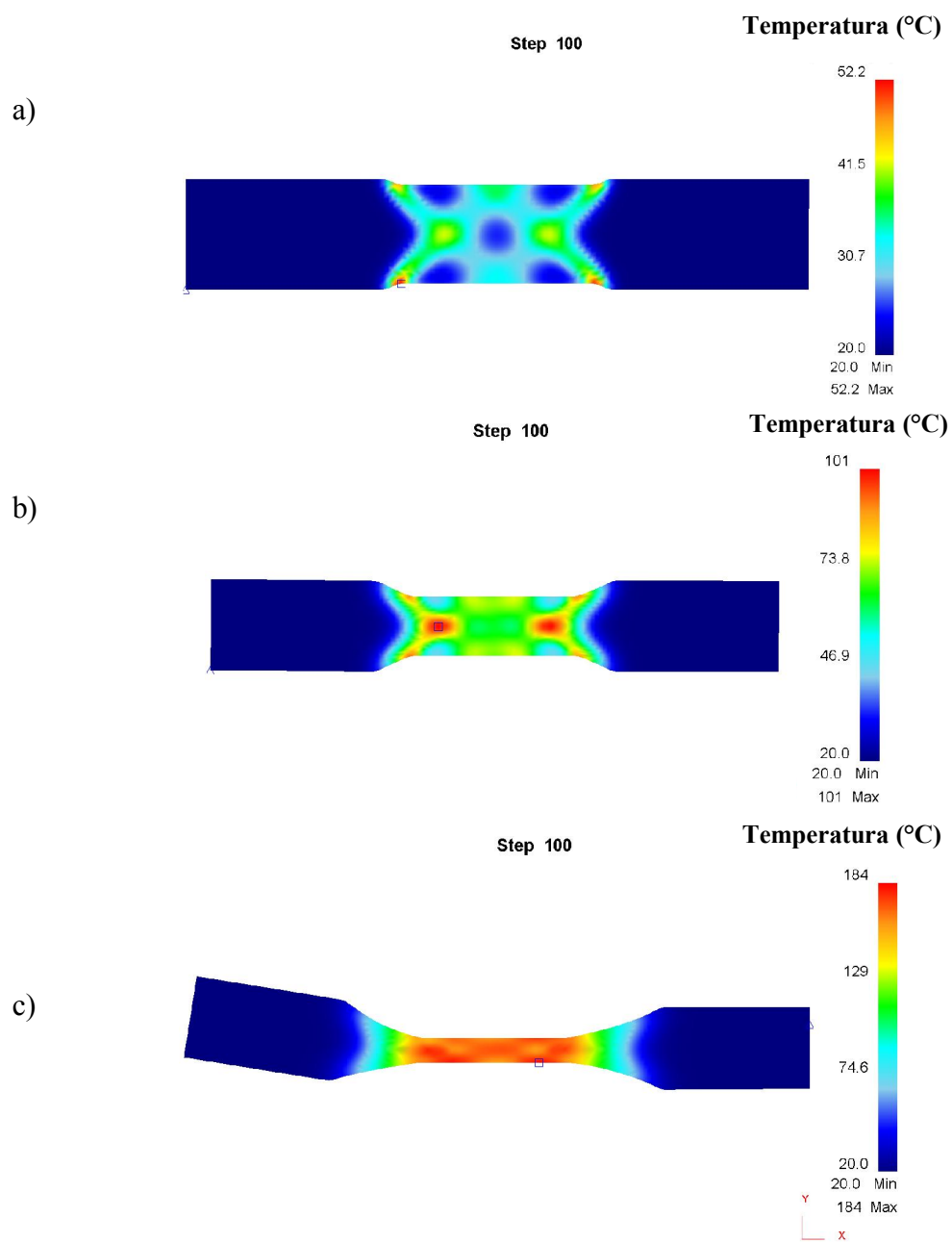


Figura 51.- Distribución de temperaturas (°C) para las pruebas de compresión en frío en función de la reducción: a) 10%, b) 35% y c) 70%.

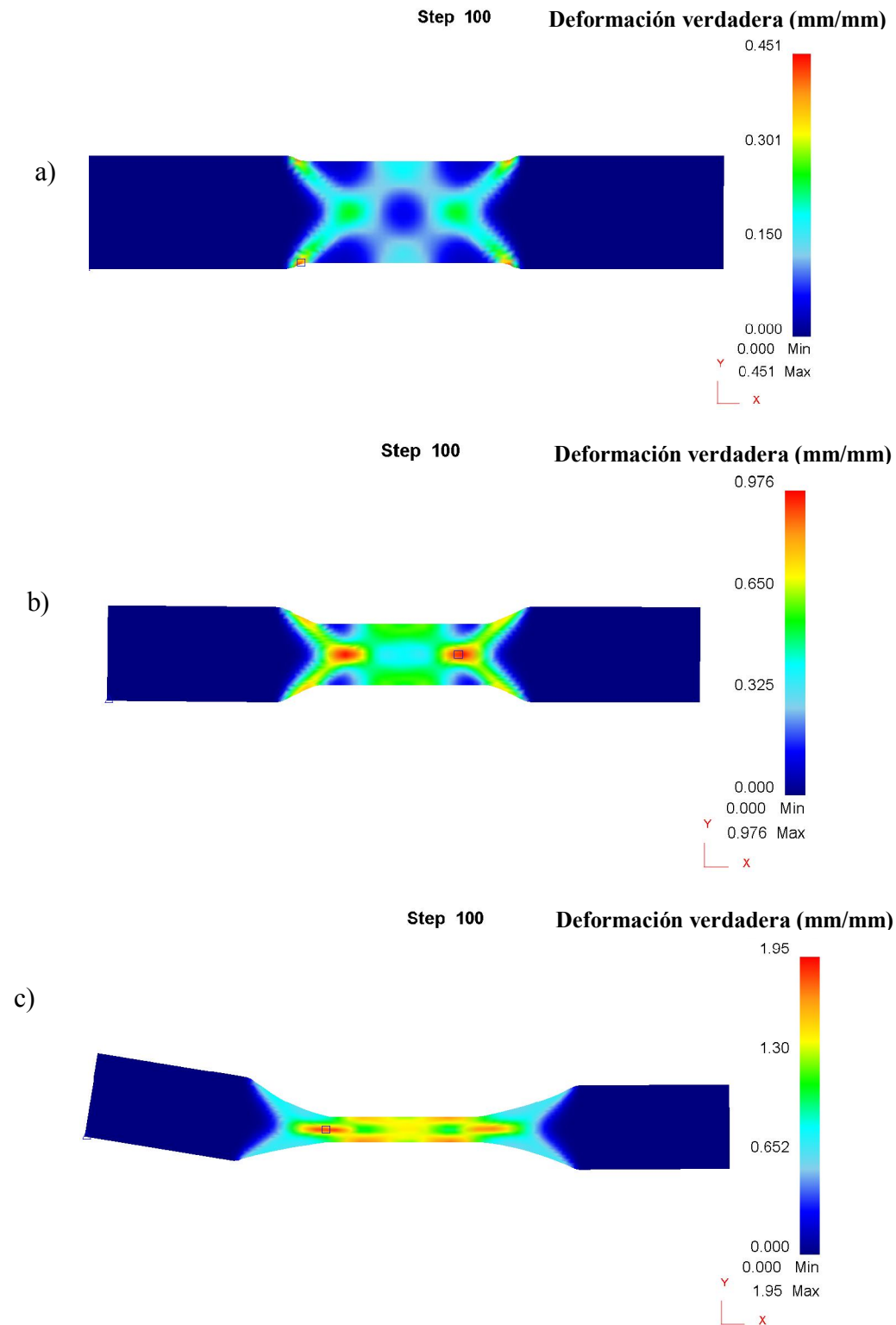


Figura 52.- Distribución de deformación verdadera para la pruebas de compresión en frío en función de la reducción: a) 10%, b) 35% y c) 70%.

La Figura 53 ilustra la distribución de esfuerzos efectivos (o von Mises) en MPa para las 3 pruebas de compresión en frío. A una reducción de 10% el modelo presentó un esfuerzo máximo de 796 MPa, mientras que para las reducciones de 35% y 70% se obtuvieron esfuerzos máximos de 849 y 900 MPa, respectivamente.

La Tabla 8.2 muestra los esfuerzos máximos generados en función de la reducción. Se aprecia que al incrementar el porcentaje de reducción hay un aumento en el nivel de esfuerzos, los cuales se deben principalmente a la gran cantidad de defectos lineales que se generan (dislocaciones) durante la deformación provocando dicho aumento en resistencia.

Tabla 8.2.- Esfuerzos máximos en función de la reducción.

% reducción	Esfuerzo máximo (MPa)
10	796
35	849
70	900

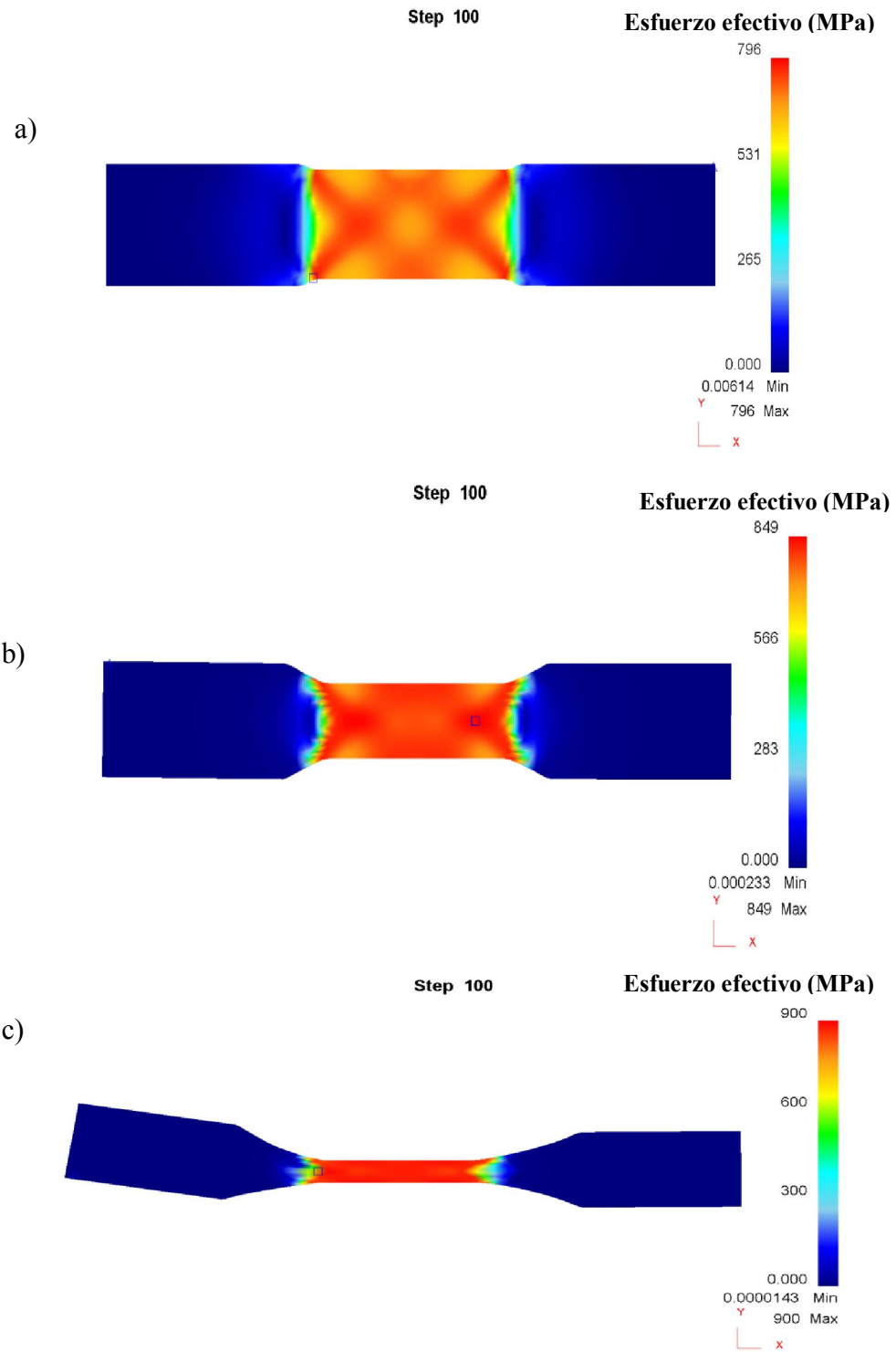


Figura 53.- Distribución de esfuerzos en función de la reducción a) 10%, b) 35% y c) 70%.

### 8.2.2. Evolución microestructural mediante el modelo JMAK

La evolución de la cinética de recristalización estática para las 3 reducciones se muestra en la Figura 54. En esta Figura,  $X$  representa a la fracción recristalizada.

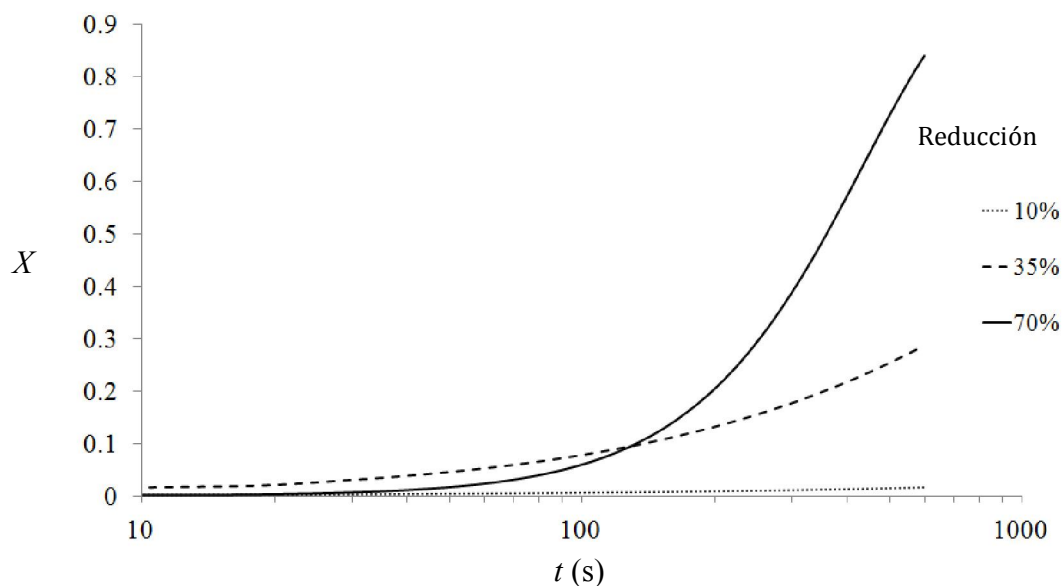


Figura 54.- Fracción recristalizada ( $X$ ) en función de la reducción para el material A1.

Se observa un aumento en la fracción recristalizada mediante el modelo JMAK al aumentar la reducción. El comportamiento de la Figura 54 concuerda con lo reportado en la referencia [85] en la cual se realizaron las pruebas experimentales descritas en la sección 7.2.

En las Figuras 55 y 56 se utilizaron 200 incrementos para el análisis térmico con un incremento de tiempo de 3 segundos resultando en los 600 segundos de análisis. Sumando estos incrementos a los 100 incrementos previos de la deformación se obtienen los 300 incrementos mostrados en dichas figuras.

La Figura 55 muestra las distribuciones de fracción recristalizada estáticamente para las muestras comprimidas a reducciones de 10%, 35% y 70%, y luego calentadas a

800°C por 10 minutos. La fracción recristalizada se comporta homogéneamente en toda la zona sujeta a deformación plana.

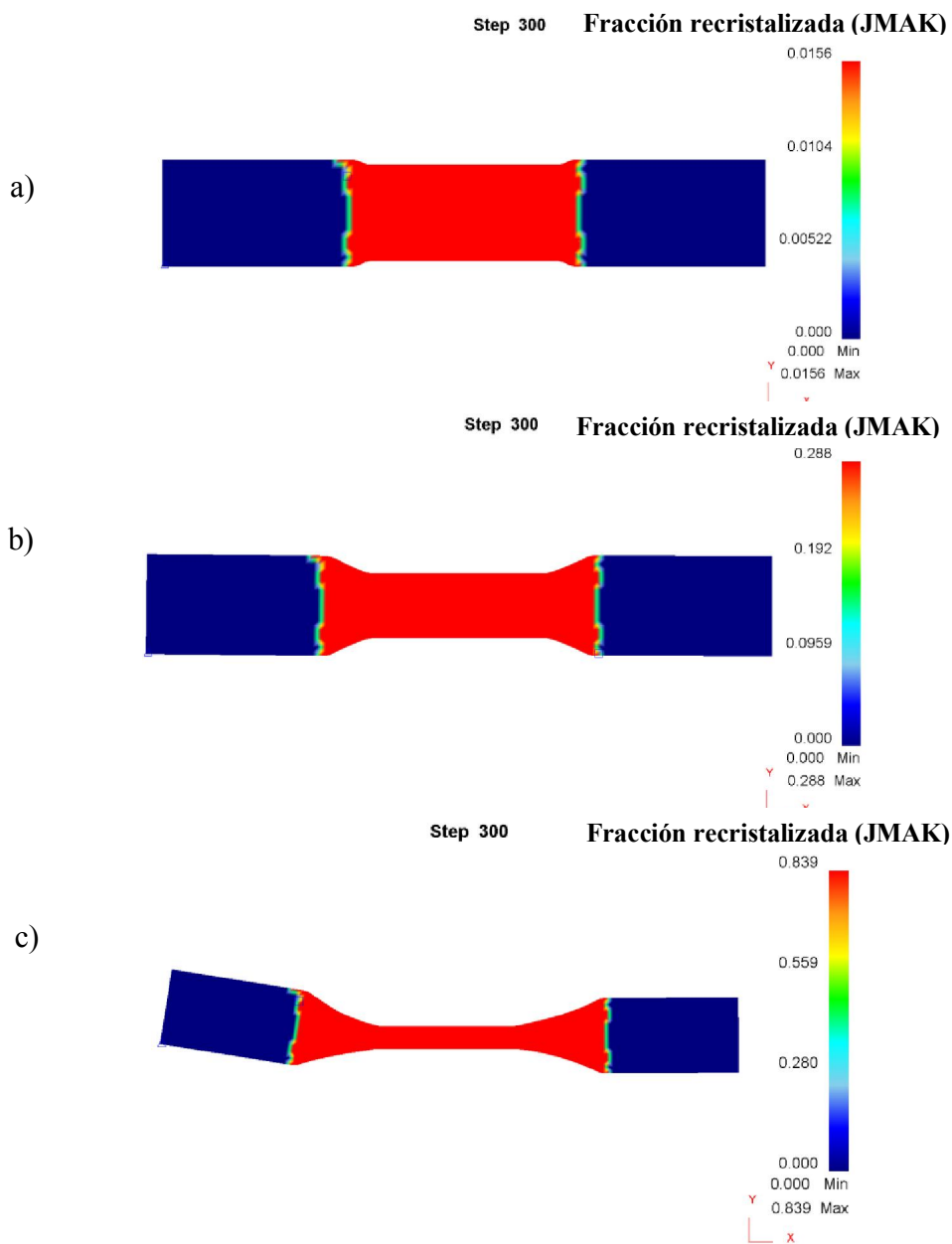


Figura 55.- Distribución de la fracción recristalizada estáticamente, material A1 calentado a 800 °C por 10 minutos y previamente deformado con reducciones de: a) 10%, b) 35% y c) 70%.

La Tabla 8.3 muestra la comparación de las fracciones recristalizadas calculadas en DEFORM y las reportadas en literatura, [85], para las mismas condiciones de

deformación y temperatura de calentamiento. Los porcentajes de error de la fracción recristalizada fueron menores al 10%, excepto para la reducción del 10%, el cual fue del 50%.

Tabla 8.3.- Comparación de la fracción recristalizada, calculada y reportada con literatura [85].

% reducción	Fracción recristalizada calculada (JMAK)	Fracción recristalizada reportada en la referencia [85]	% error
10	0.015	0.01	50
35	0.287	0.31	7.4
70	0.838	0.825	1.5

Sin embargo, el porcentaje de error no afectó a los resultados en el tamaño de grano obteniéndose un porcentaje de error del 7.14% por lo que se puede concluir que los resultados numéricos concuerdan con los resultados experimentales de la literatura para el modelo JMAK (ver Tabla 8.4). Estos resultados sugieren que el porcentaje de error para la fracción recristalizada estáticamente disminuye al aumentar el porcentaje de reducción.

La Figura 56 muestra la distribución de los tamaños de grano recristalizados para las muestras tratadas a 800°C por 10 minutos en función de la reducción. Los resultados sugieren que al aumentar la reducción, el tamaño de grano disminuye. En la Figura 56a) se muestra una distribución heterogénea del tamaño de grano cuyo valor promedio se encuentra en 120  $\mu\text{m}$ . Para los casos de 35 y 70% de reducción (Figuras 56b y 56c), se observa una distribución más homogénea del tamaño de grano con valores de 32.4  $\mu\text{m}$  y 13.7  $\mu\text{m}$ , respectivamente. Los resultados indican que los tamaños de grano más grandes se desarrollan en las muestras que tienen menor energía almacenada. Una menor energía almacenada promueve una menor fracción recristalizada, es decir, hay una menor nucleación de nuevos granos y por lo tanto el tamaño de grano recristalizado es mayor.



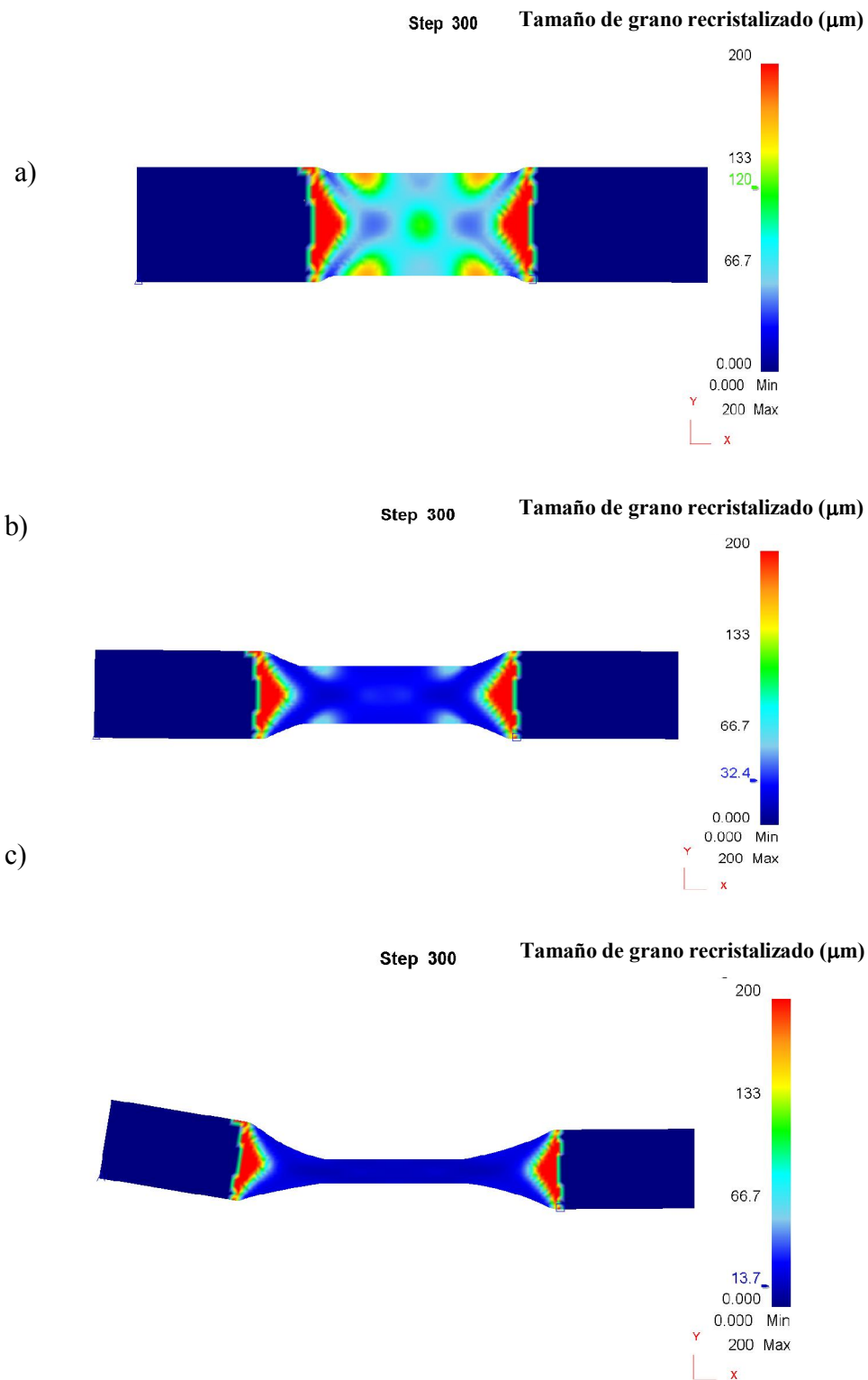


Figura 56.- Tamaño de grano recristalizado después del calentamiento a 800°C por 10 minutos en función de la reducción, a) 10%, b) 35% y c) 70%.

### 8.2.3. Evolución microestructural mediante autómatas celulares

La Figura 57 ilustra la microestructura simulada mediante autómatas celulares a diferentes tiempos para la muestra tratada a 800°C después de haber sido deformada previamente a un 10% de reducción; se puede apreciar que se generaron algunos núcleos en las fronteras de grano originando por lo tanto un tamaño de grano promedio final de 157.18  $\mu\text{m}$ . Esta poca generación de núcleos puede atribuirse a la poca cantidad de deformación que no favorece una alta tasa de nucleación.

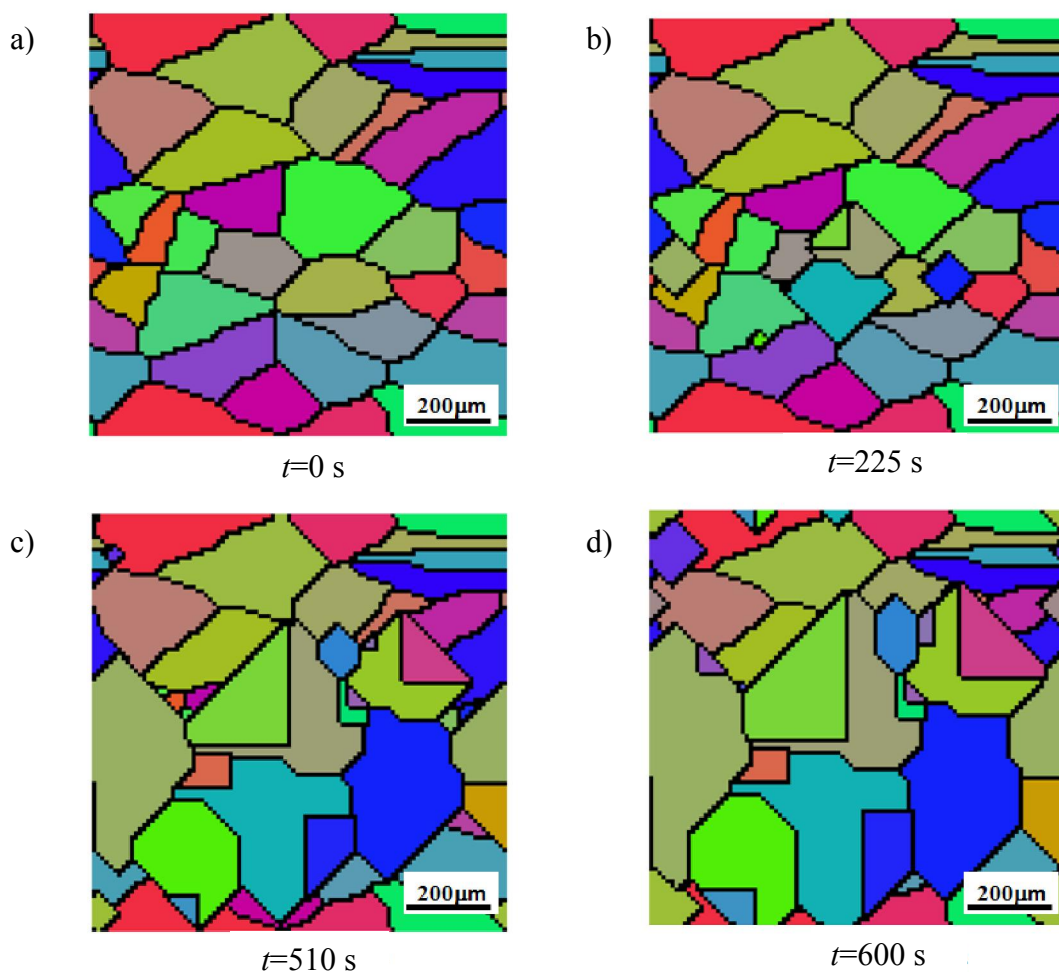


Figura 57.- Microestructura con 10% reducción seguida de un calentamiento a 800°C a: a) 0s, b) 225 s, c) 510s y d) 600 s.

La Figura 58 muestra la evolución microestructural simulada para la muestra tratada a 800°C después de haber sido deformada a un 35% de reducción. Se observó una mayor cantidad de nucleación en las fronteras de grano debido a que hubo una mayor deformación que provocó una mayor energía almacenada durante el proceso de compresión en frío. El tamaño final de grano tuvo un valor de 36.16  $\mu\text{m}$ .

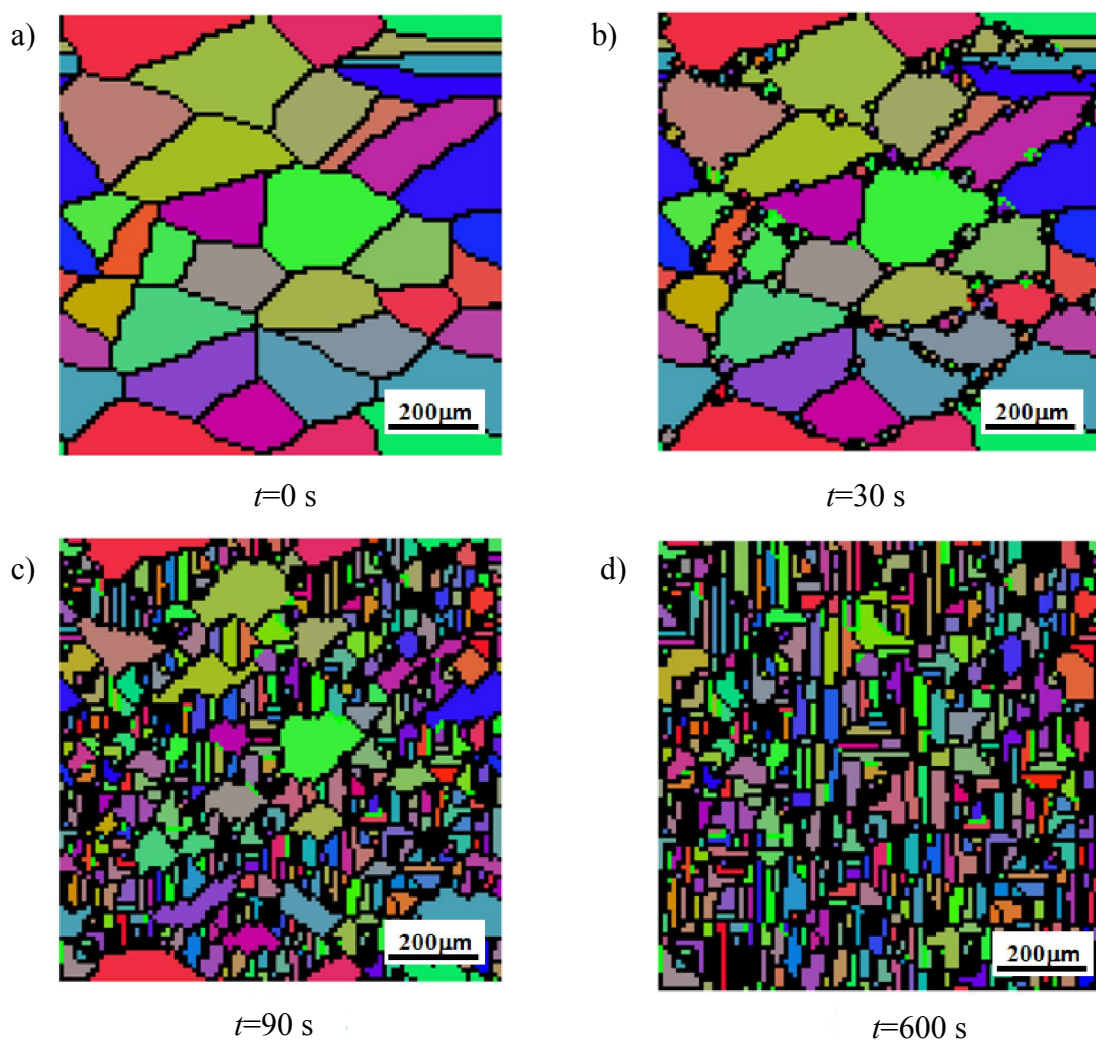


Figura 58.- Microestructura con 35% reducción seguida de un calentamiento a 800°C a: a) 0 s, b) 30 s, c) 90 s y d) 600 s.

La evolución de microestructural para la muestra tratada a 800°C por 10 minutos y previamente deformada a un 70% de reducción se muestra en la Figura 59. En este caso,

la muestra contiene la mayor energía almacenada comparada con los casos anteriores (ver Figuras 57 y 58), lo que origina una mayor nucleación en las fronteras de grano durante la recrystalización resultando en un tamaño de grano más pequeño cuyo tamaño final fue de  $11.28 \mu\text{m}$ . Esto indica que una mayor reducción favorece una mayor probabilidad de formación de nuevos núcleos para la recrystalización en las fronteras de grano que originará un tamaño final de grano menor. Este comportamiento concuerda lo reportado en la referencia [90] en la que se desarrollaron modelos de compresión y de recrystalización estática en probetas cilíndricas aceros de bajo carbono utilizando el método de autómatas celulares.

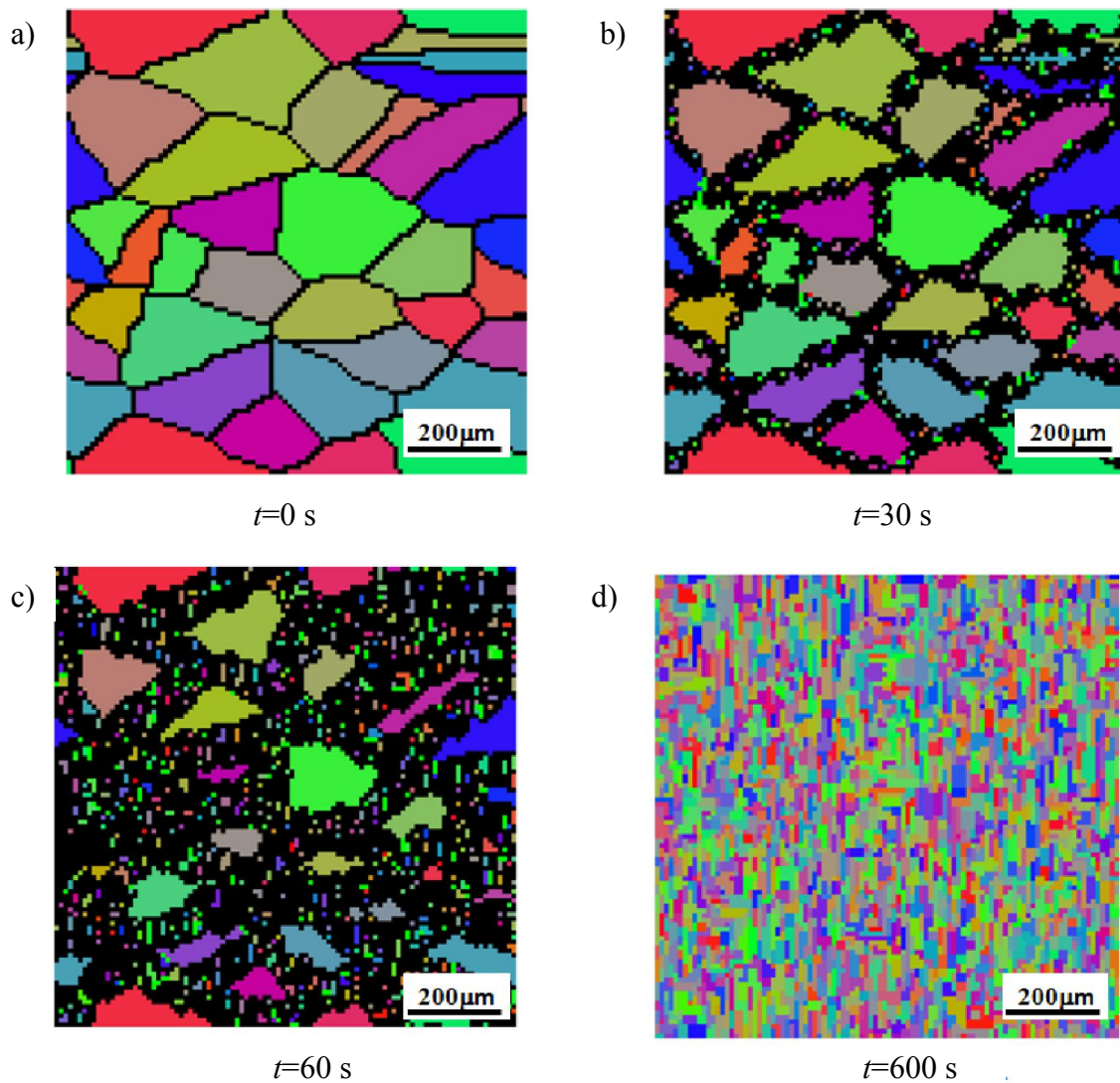


Figura 59.- Microestructura con 70% reducción seguida de un calentamiento a  $800^\circ\text{C}$  a: a) 0s, b) 30 s, c) 60 s y d) 600 s.

La Tabla 8.4 muestra la comparación de los tamaños finales de grano mediante los 2 métodos, JMAK y autómatas celulares. Para las reducciones de 10% y 35%, el modelo JMAK predijo tamaños de grano con pequeños porcentajes de error comparado con el de autómatas celulares obteniéndose un máximo porcentaje de error de 40.3%. Sin embargo, en el caso de mayor reducción (70%), que resultó en un tamaño de grano menor, el método de autómatas celulares predijo mejor los tamaños de grano obteniéndose un porcentaje de error del 12.8% contra un 37% en el modelo JMAK. Se observó que al aumentar la reducción, el porcentaje de error utilizando el método de autómatas celulares disminuye.

Tabla 8.4.- Comparación de los tamaños de grano (en  $\mu\text{m}$ ) para los modelos generados.

% reducción	JMAK	Autómatas celulares (AC)	Literatura [70]	%error (JMAK)	%error (AC)
10	120	157.18	112	<b>7.14</b>	40.3
35	32.4	36.16	30	<b>8</b>	20.5
70	13.7	11.28	10	37	<b>12.8</b>

Nota: La temperatura de recocido después de la compresión fue de 800°C.

## 8.3. Resultados de la laminación en caliente

### 8.3.1 Deformación y temperatura

#### 8.3.1.1. Acero eléctrico con 2 fases (material A2)

Las Figuras 60 a 62 muestran la distribución de temperaturas durante el primer pase, interpase y segundo pase, respectivamente. Durante el primer pase (Figura 60) se obtuvo una temperatura de 1060°C en la superficie de contacto entre el rodillo y el planchón, después la temperatura superficial aumenta a un valor de 1090 °C justo al salir el planchón del primer pase; esto se debe a la conducción de calor desde el centro del planchón hacia su superficie. Al terminar el interpase (Figura 61), la temperatura superficial cae aproximadamente un valor de 40°C lo cual concuerda con lo reportado en la literatura [54]. Posteriormente el planchón sale a una temperatura de 1030 °C después del segundo pase (Figura 62).

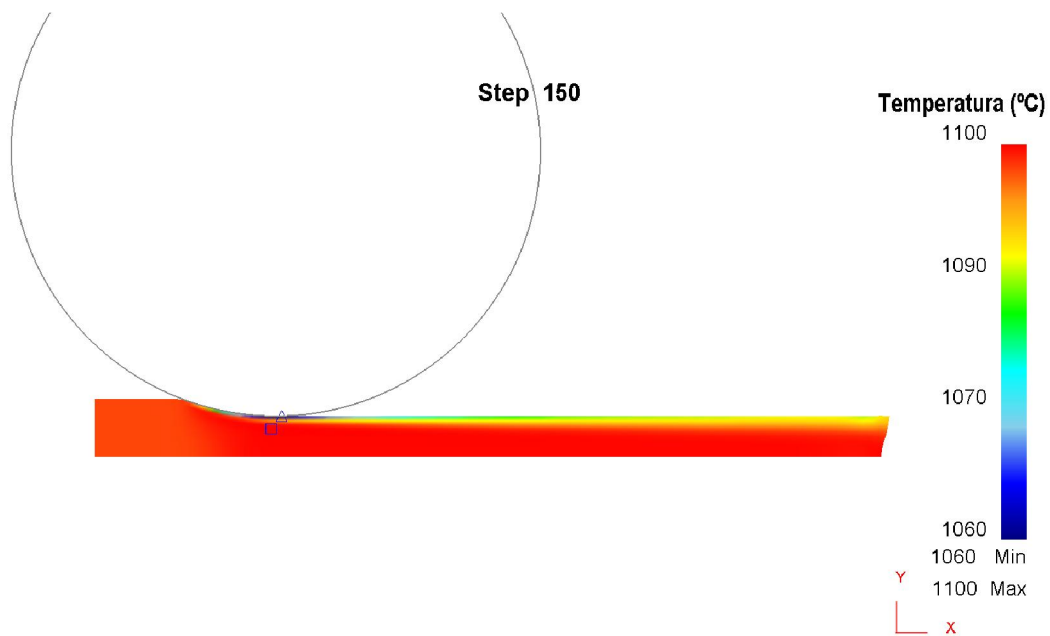


Figura 60.- Distribución de temperaturas durante el primer pase (reducción 30%) para el material A2,  $t=0.825$  s.

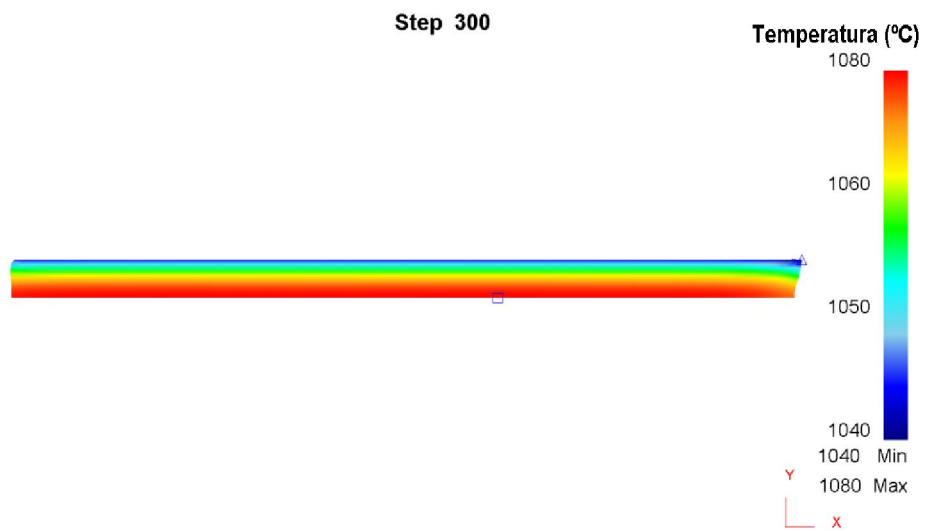


Figura 61.- Distribución de temperaturas al final del interpase de 15 segundos para el material A2 después de haber sido reducido 30%.

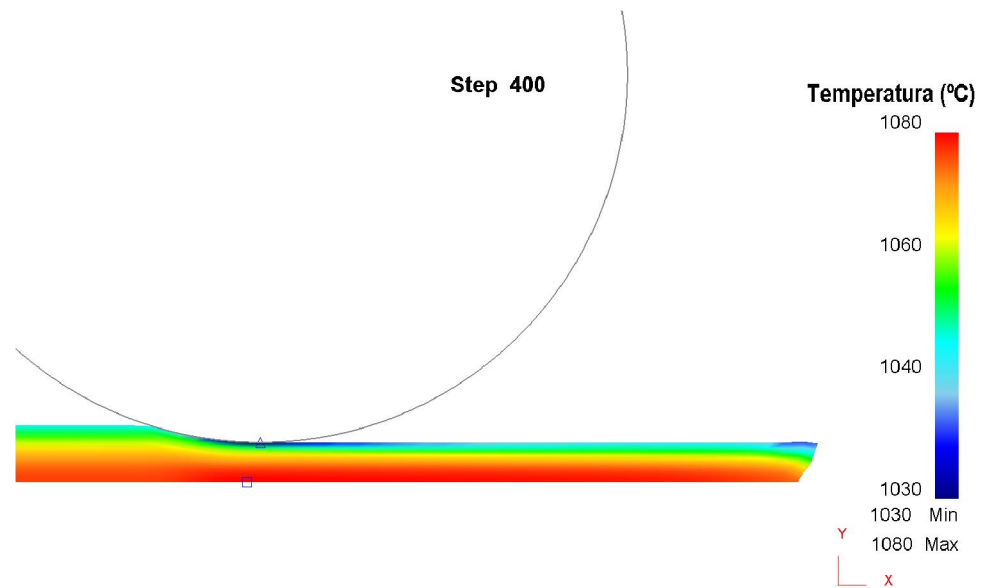


Figura 62.- Distribución de temperaturas durante el segundo pase (reducción 30%) para el material A,  $t=16.65$  s.

El historial térmico de la superficie y del centro se ilustra en la Figura 63. Se puede apreciar en esta figura la caída abrupta de temperatura durante los pases de laminación y un ligero incremento en temperatura en el centro debido a la energía de deformación.

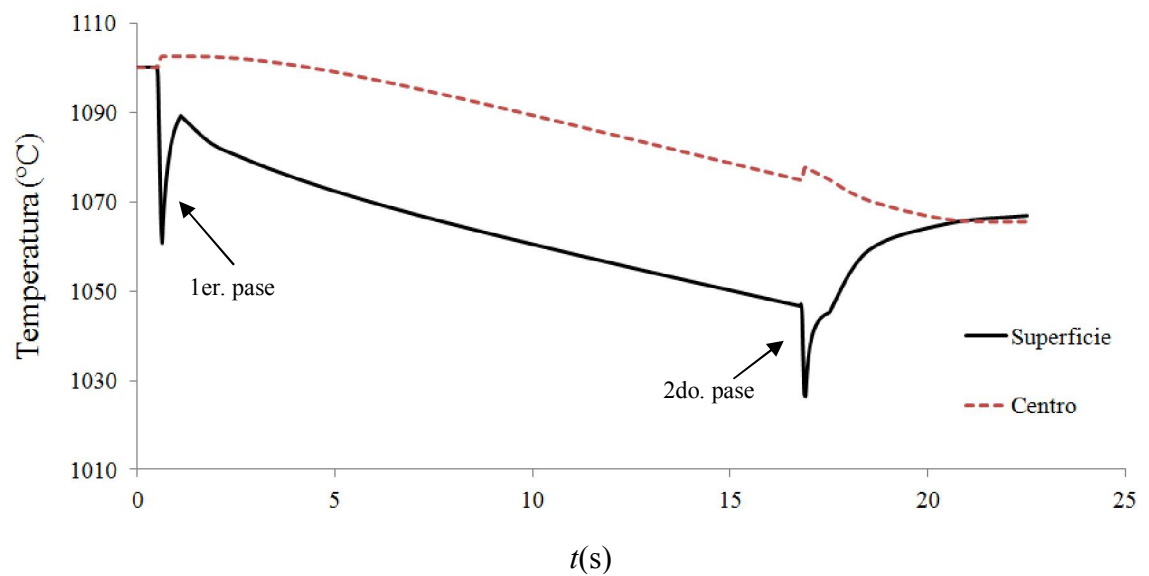


Figura 63.- Evolución térmica durante el proceso de laminación en caliente con 2 pases y un interpase de 15 segundos.

Las Figuras 64 y 65 muestran la distribución de deformaciones verdaderas ( $\varepsilon$ ) para ambos pases, y se puede observar una distribución heterogénea de deformación siendo mayor en la zona de contacto entre el rodillo y el planchón. Al final del primer pase  $\varepsilon=0.591$  y al final del segundo pase  $\varepsilon=1.14$ .

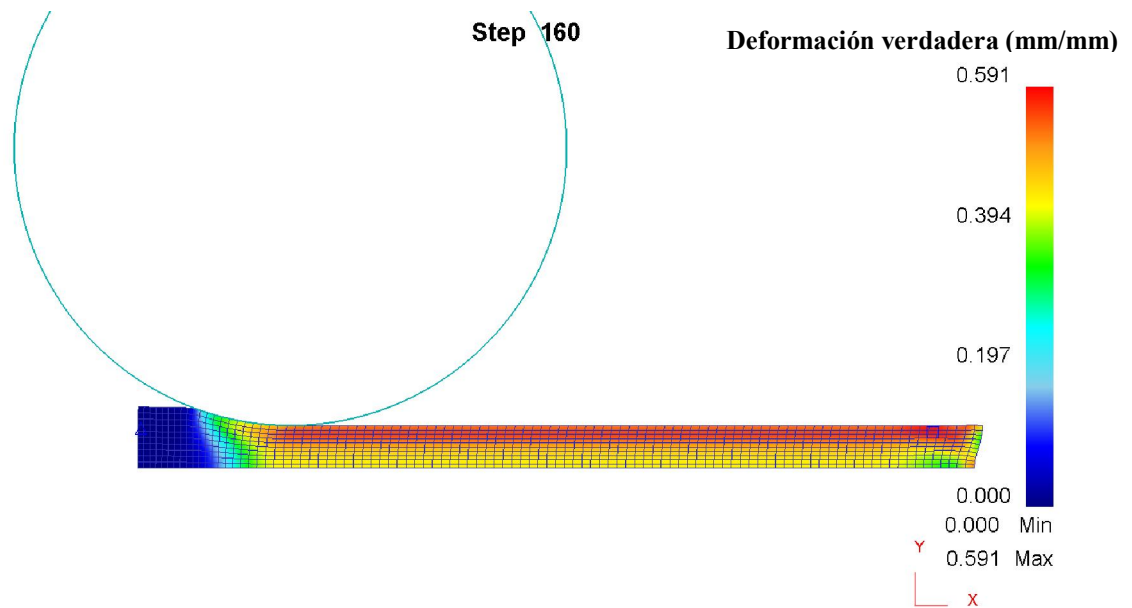


Figura 64.- Distribución de deformación verdadera durante el primer pase (material A2),  $t=0.88$  s.

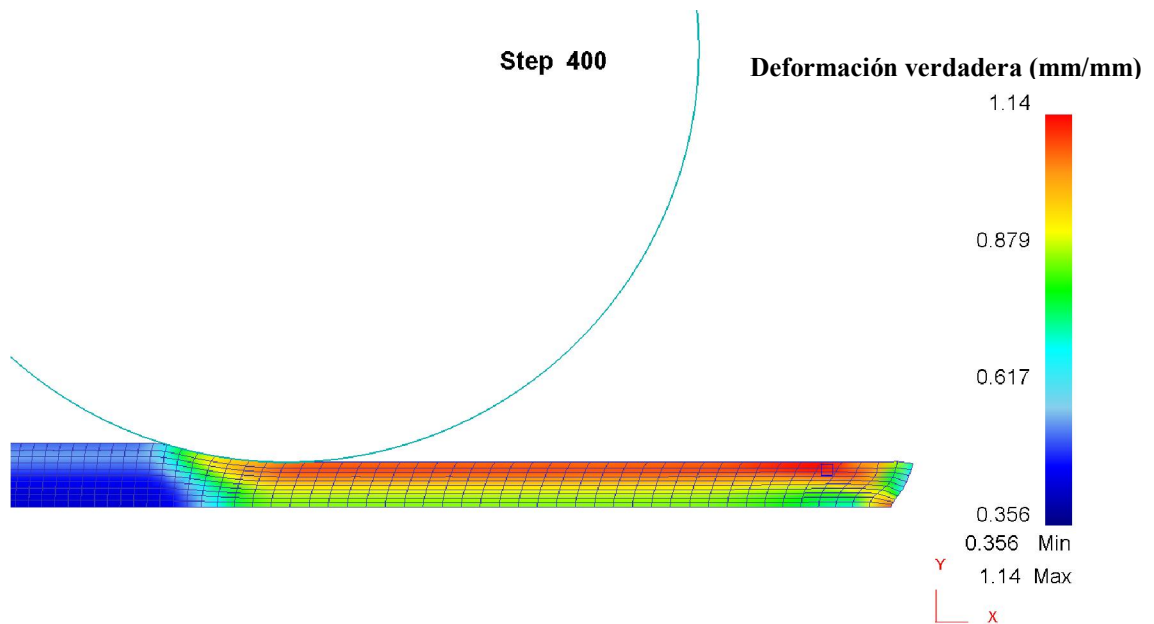


Figura 65.- Distribución de deformación verdadera durante el segundo pase (material A2),  $t=16.65$  s.



### 8.3.1.2. Acero eléctrico ferrítico (material A3)

La Figura 66 muestra la distribución de temperaturas en °C para el acero al silicio totalmente ferrítico (material A3).

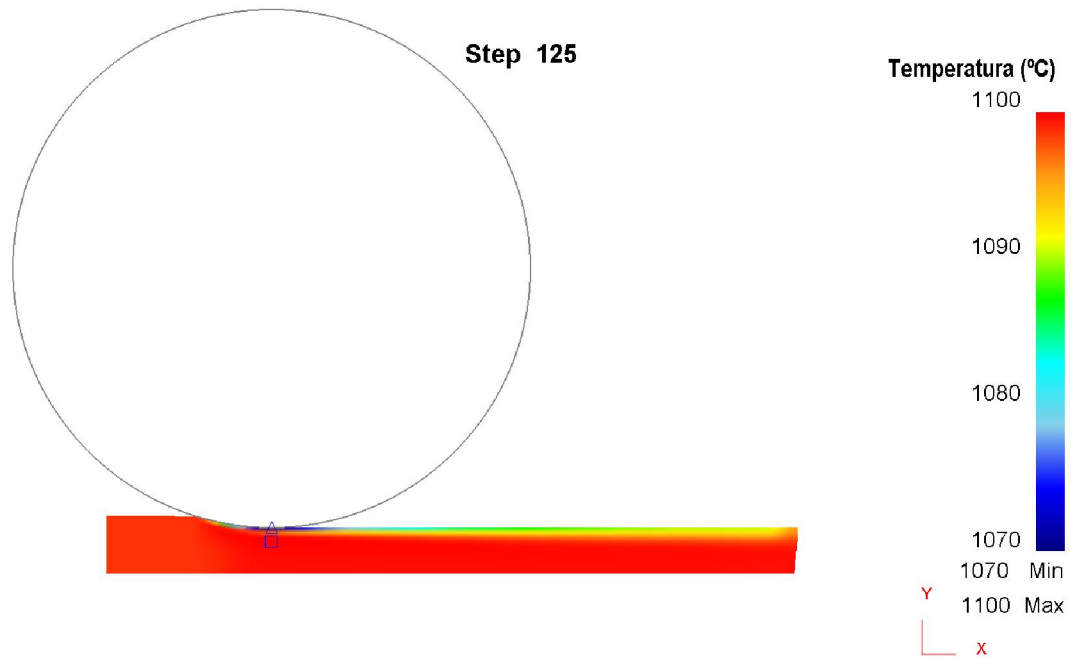


Figura 66.- Distribución de temperaturas durante el pase de 20% de reducción (material A3),  $t=0.6875$  s.

La distribución de deformaciones verdaderas durante el pase de laminación se ilustra en la Figura 67.

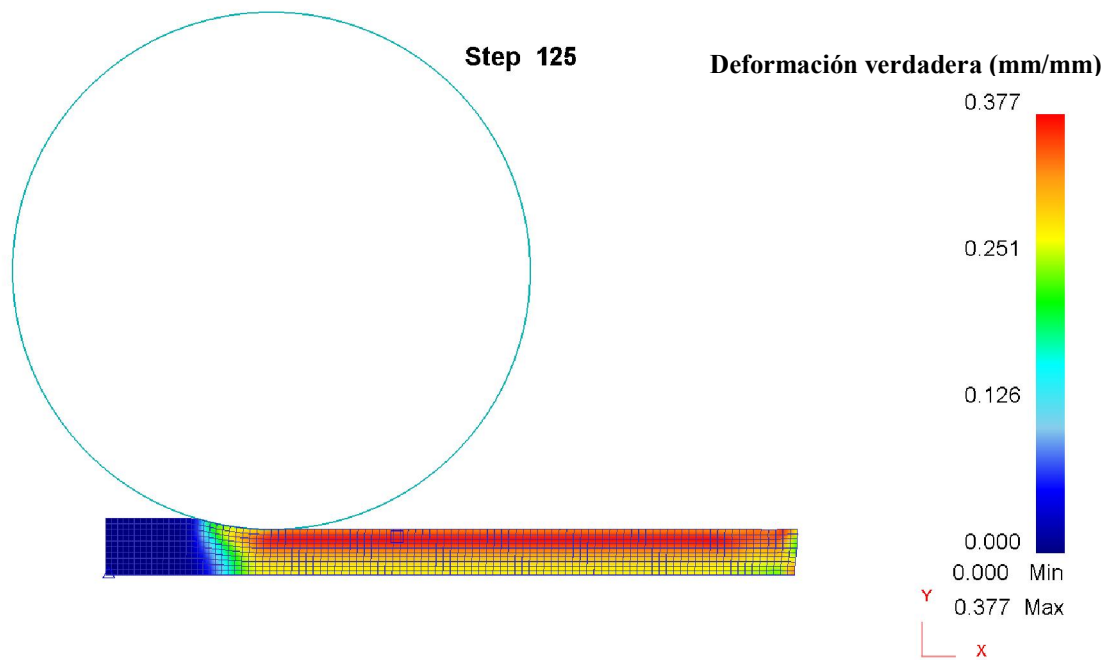


Figura 67.- Distribución de deformación verdadera para el material A3 durante el pase de laminación,  $t=0.6875$  s.

La Figura 68 muestra una comparación de la distribución de esfuerzos en el primer pase de laminación para ambos materiales. Se puede observar en la Figura 68a) que el nivel de esfuerzos es mayor comparado con la Figura 68b) debido a la presencia de austenita y a la cantidad de reducción, ver ecuación (7.3).

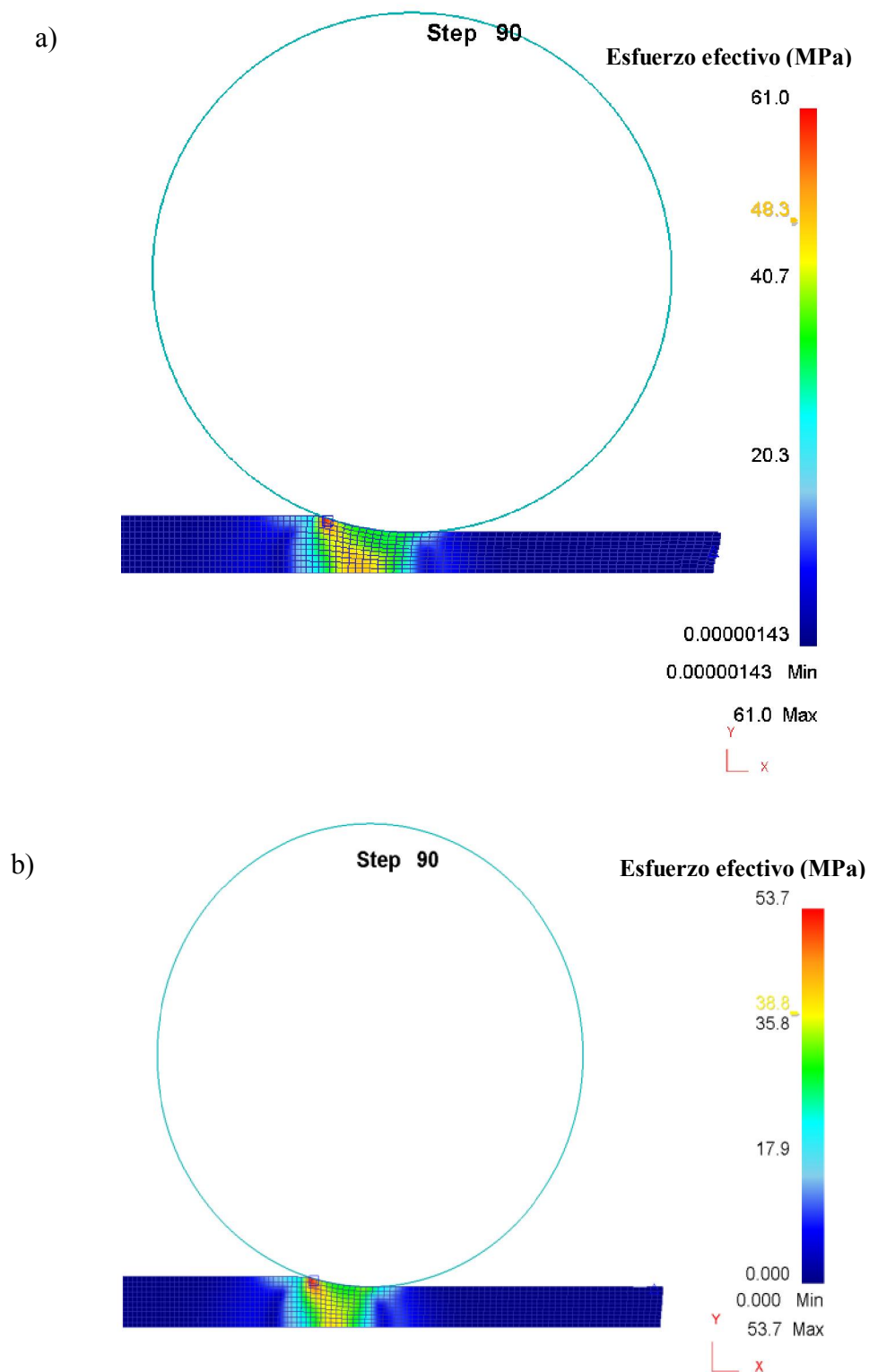


Figura 68.- Distribución de esfuerzos durante el primer pase de laminación ( $t=0.495s$ ) para el material: a) A2 (reducción 30%) y b) A3 (reducción 20%).

### 8.3.4 Evolución microestructural mediante el modelo JMAK

#### 8.3.4.1. Acero eléctrico con 2 fases (material A2)

La Figura 69 muestra la cinética de recrystalización estática para el material A2 después de haber sido deformado en 2 pases de laminación con 30% de reducción y después calentado a 1100°C durante 2 minutos [5].

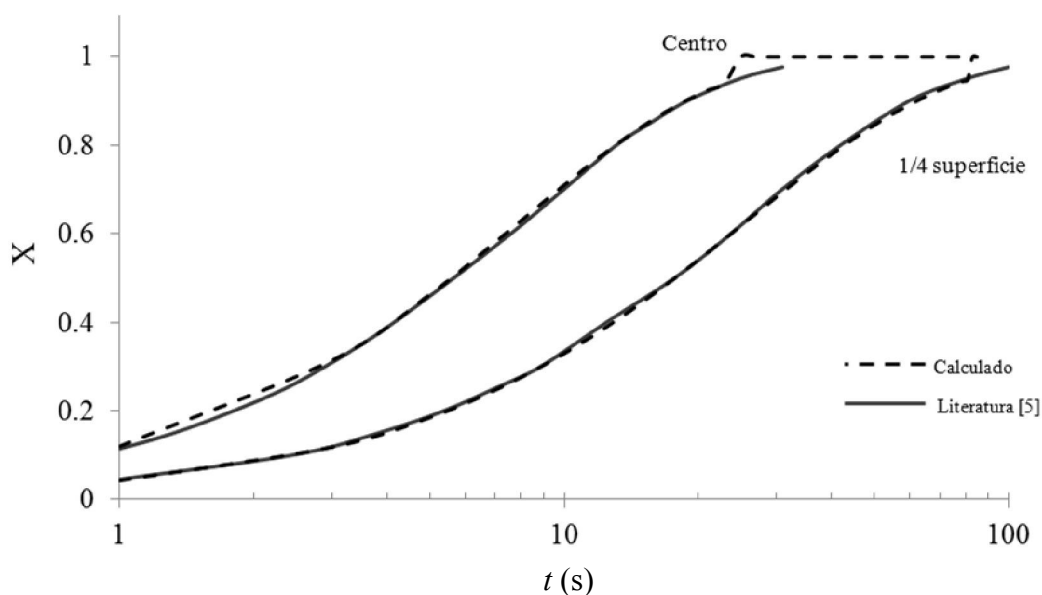


Figura 69.- Cinética de recrystalización estática para el material A2, deformado 2 pases con 30% de reducción cada uno y después calentado a 1100°C por 2 minutos.

Se puede observar en la Figura 69 que la cinética de recrystalización en el centro del planchón es más rápida que a un cuarto del espesor debido a la cantidad de austenita presente en dicha región especialmente durante la deformación ya que como se mencionó en la sección 5.6 existe una densidad de dislocaciones mayor en la región con austenita que en la región ferrítica lo que contribuye a una mayor nucleación lo cual produce una velocidad mayor de recrystalización [5]. En la Figura 69 también se observa que los valores de recrystalización calculados concuerdan con los reportados en literatura [5].

La Figura 70 muestra la distribución de tamaño de grano recristalizado en  $t=25$  segundos. El tamaño de grano para la región ferrítica es de  $225 \mu\text{m}$  y en la región con 16% de austenita es de  $136 \mu\text{m}$ , diferencia debido a las cinéticas de recristalización mostradas en la Figura 69.

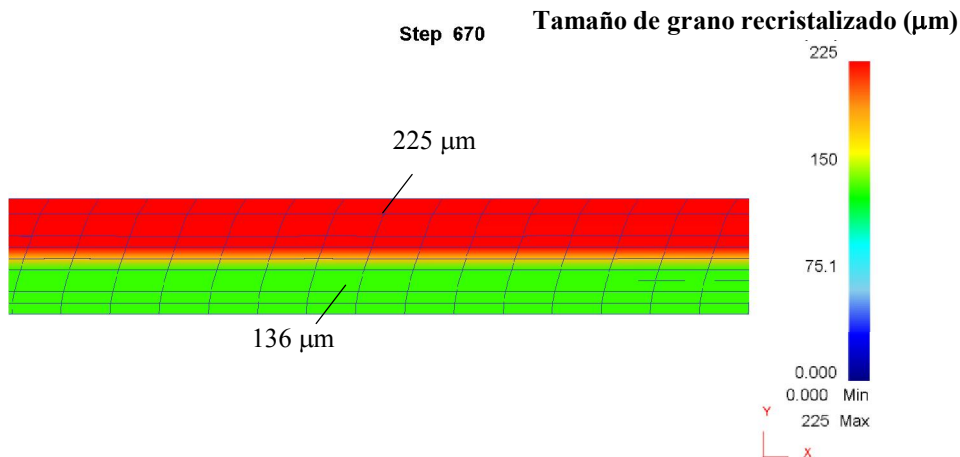


Figura 70.- Distribución de tamaño de grano recristalizado a través del espesor para el material A2 laminado en 2 pases de 30% de reducción a  $1100 \text{ }^\circ\text{C}$  y posteriormente calentado a  $1100^\circ\text{C}$  por 25 segundos.

#### 8.3.4.2. Acero eléctrico ferrítico (material A3)

La Figura 71 muestra la cinética de recristalización estática para el material A3 deformado en 1 pase 20% de reducción y luego calentado a  $1100^\circ\text{C}$  por 20 minutos.

Los resultados de la Figura 71 concuerdan con los reportados en literatura [54]. Sin embargo, se observa un salto en la fracción recristalizada de 95% a 100% que podría estar asociado con el algoritmo de DEFORM por cuestiones de estabilidad y convergencia de la solución numérica de la ecuación JMAK.

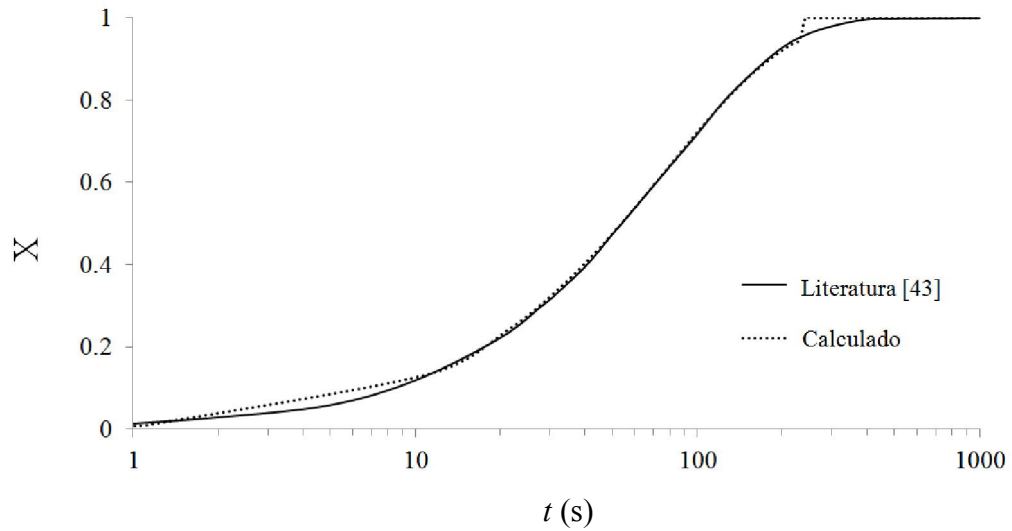


Figura 71.- Cinética de recristalización para el material A3 deformado en un pase de laminación a 20% de reducción y después calentado a 1100°C por 20 minutos.

La Figura 72 muestra la distribución de tamaño de grano recristalizado. Para el caso de la Figura 72, según la Figura 48, se esperaría un tamaño de grano final de aproximadamente 550  $\mu\text{m}$ . Sin embargo, se puede observar que todo el espesor mostró un tamaño de grano de 180  $\mu\text{m}$ .



Figura 72.- Distribución de tamaño de grano recristalizado para el material A3.

Recordando de la ecuación (5.51) incorporada en el paquete comercial DEFORM, cuando el tamaño de grano recristalizado es mayor al tamaño inicial de grano, el algoritmo toma nuevamente el tamaño inicial de grano. Por lo tanto, todo el espesor tiene un tamaño final de grano de 180  $\mu\text{m}$ . Esto sugiere que debería existir un crecimiento de grano pero no se contaron con suficientes datos experimentales para obtener los coeficientes de la ecuación (5.54).

### 8.3.5 Evolución microestructural mediante autómatas celulares

#### 8.3.5.1. Acero eléctrico con 2 fases (material A2)

La Figura 73 muestra las microestructuras simuladas para la recristalización estática para el material A2. En la Figura 73a) el tamaño de grano promedio es de 231  $\mu\text{m}$  y en la 73b) es de 112  $\mu\text{m}$ . La Tabla 8.5 muestra la comparación de tamaños de grano.

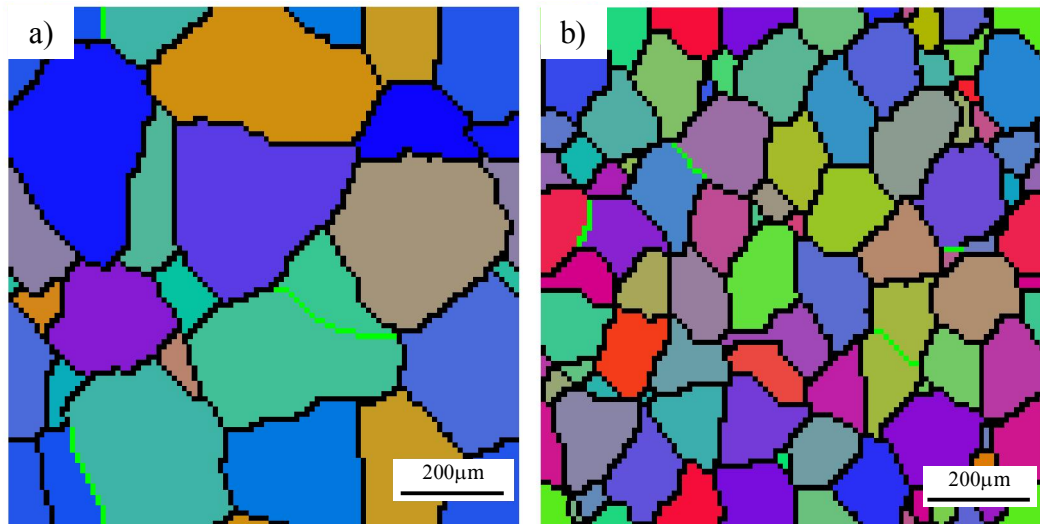


Figura 73.- Microestructura simulada mediante autómatas celulares para el material A2, deformado en 2 pases de 30% de reducción y luego calentado a 1100 °C por 20 minutos, a)1/4 del espesor, b)centro.

Tabla 8.5.- Comparación de los tamaños de grano mediante las diferentes técnicas de evolución microestructural para el material A2.

Material A2 % de austenita	Tamaño de grano ( $\mu\text{m}$ )			%error	
	JMAK	Autómatas celulares (AC)	Literatura [42,43]	JMAK	AC
0	225	230.6	230.1	2.21	<b>0.21</b>
16	136	111.9	140.5	<b>3.20</b>	20.35

### 8.3.5.2. Acero eléctrico ferrítico (material A3)

La Figura 74 muestra la microestructura simulada mediante autómatas celulares para el material A3 deformado en un pase de laminación con reducción de 20% y calentado a 1100°C. Para la Figura 74, el tamaño de grano promedio es de 567  $\mu\text{m}$ . La Tabla 8.6 muestra la comparación de los tamaños de grano.

Tabla 8.6.- Comparación de los tamaños de grano mediante las diferentes técnicas de evolución microestructural para el material A3.

Material A3 % de austenita	Tamaño de grano ( $\mu\text{m}$ )			%error	
	JMAK	Autómatas celulares (AC)	Literatura [43], ver Figura 48.	JMAK	AC
0	180	567	515	65.04	<b>10.09</b>

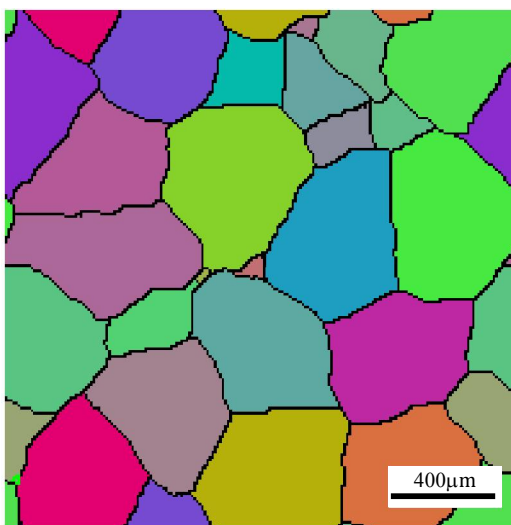


Figura 74.- Microestructura simulada para el material A3.



## 8.4. Predicción de propiedades magnéticas

Para la fuerza coercitiva ( $H_c$ ) existe una relación entre ésta y el inverso del tamaño de grano, tal como se mencionó en la sección 2.4, ecuación (8.1), [20,91,92]:

$$H_c = A + B \left( \frac{1}{d} \right) \quad (8.1)$$

Una ecuación similar existe para la permeabilidad ( $\mu$ ), ecuación (8.2):

$$\frac{1}{\mu} = p + q \left( \frac{1}{d} \right) \quad (8.2)$$

donde  $d$  es el tamaño de grano en  $\mu\text{m}$  y  $A$ ,  $B$ ,  $p$  y  $q$  son parámetros que dependen del material. La Tabla 8.7 muestra valores de  $A$ ,  $B$ ,  $p$  y  $q$  tomados de literatura [91]:

Tabla 8.7.- Parámetros de las ecuaciones (8.1) y (8.2).

$A$	$B$	$p$	$q$
5.1	270	$1.3 \times 10^{-5}$	$3.9 \times 10^{-4}$

Para el cálculo de las pérdidas ( $P$ ) existe una expresión en la cual éstas dependen del tamaño de grano y de la textura [92]:

$$P = a + \frac{b}{d} + cA_T \quad (8.3)$$

donde  $a$ ,  $b$  y  $c$  son parámetros que dependen del material y  $A_T$  es un parámetro de la textura.

La Tabla 8.8 muestra los coeficientes de la ecuación (8.3) para calcular las pérdidas por histéresis ( $P_h$ ) en W/Kg para un acero eléctrico con 3% de silicio, tomados de literatura [20]:

Tabla 8.8.- Parámetros de la ecuación (8.3).

$a$	$b$	$A_T$
2.52	62.5	0

Aplicando las ecuaciones (8.1) a la (8.3) para predecir la fuerza coercitiva, la permeabilidad y las pérdidas por histéresis en los aceros estudiados, en la Tabla 8.9 se muestran los resultados obtenidos para dichos aceros.

Tabla 8.9.- Predicción de la fuerza coercitiva, permeabilidad y pérdida por histéresis para los aceros eléctricos estudiados en este trabajo de investigación.

Compresión en frío		$H_c$ (A/m)	$\mu$	$P_h$ (W/Kg)
10% red.		7.35	61538.46	3.04
35% red.		13.43	39940.82	4.44
70% red.		29.03	21019.6	8.06
Laminado en caliente				
A2	0% $\gamma$	6.27	68069.81	2.79
	16% $\gamma$	7.08	63021.31	2.97
A3		5.57	73057.59	2.63

De la Tabla 8.9, para los modelos de compresión en frío, un tamaño de grano más fino debido al aumento de reducción resulta en aumento en las pérdidas por histéresis, comportamiento predicho por la ecuación (8.3) basado en el hecho de que la formación y la aniquilación de las paredes de los dominios magnéticos origina una disipación de energía, es decir, pérdidas. La permeabilidad disminuye al aumentar la cantidad de reducción mientras que la fuerza coercitiva aumenta.

En los modelos de laminación en caliente se aprecia una mejora en las pérdidas magnéticas y una mejor permeabilidad en el material de una sola fase ferrítica (A3), mientras que la fuerza coercitiva aumenta con la presencia de la fase austenítica.

# CAPÍTULO 9

## DISCUSIÓN

### 9.1. Introducción

A continuación se muestra la discusión de los resultados obtenidos en el capítulo 8. Se hace una comparación de los resultados de la cinética de recristalización utilizando los modelos JMAK y AC con los reportados en literatura. Se mencionan las limitaciones del modelo y se discute además la dependencia de las propiedades magnéticas con la deformación.

## 9.2. Modelos de compresión en frío

Las distribuciones de temperatura, deformación y esfuerzos obtenidas mediante el método de elemento finito se utilizaron como datos de entrada para evaluar la evolución microestructural de los aceros eléctricos considerados, el cual es el objetivo principal de este trabajo.

Fue posible simular numéricamente la cinética de recristalización estática para los modelos de compresión en frío mediante el modelo JMAK. Se encontraron pequeños porcentajes de error en la fracción recristalizada excepto para el caso de 10% de reducción con un error del 50%.

Se procedió a modificar a prueba y error el exponente  $n_L$  de la deformación verdadera en la ecuación (5.51) para reducir el porcentaje de error del tamaño de grano recristalizado. La Tabla 9.1 muestra los valores de  $n_L$  obtenidos, donde se puede apreciar una sensibilidad del exponente  $n_L$  con la cantidad de deformación.

Tabla 9.1.- Exponente  $n_L$  de la ecuación (5.51) en función de la reducción.

% reducción	$n_L$	$d_{rex}$ ( $\mu\text{m}$ ) (calculado)	$d_{rex}$ ( $\mu\text{m}$ ) (real)	% error
10	-0.647	112	112	0
35	-0.61	30.6	30	2
70	-1.58	10.2	10	2

El uso del método JMAK y el de AC permitieron reproducir a los resultados experimentales reportados en la referencia [85] para compresión en frío. La tendencia que mostraron los resultados de los tamaños de grano a disminuir al aumentar la reducción (ver Tabla 8.4) también se reporta en la referencia [90]. En ese trabajo de investigación se desarrollaron modelos de compresión en frío en probetas cilíndricas hechas de acero de bajo carbono utilizando el método AC.

La Figura 75 muestra los resultados de dicho trabajo para reducciones de 15% (Figura 75a) y 30% (Figura 75b) seguidas de un tratamiento isotérmico a 600°C, donde se afirma que el aumento en reducción resultó en un tamaño de grano más fino.

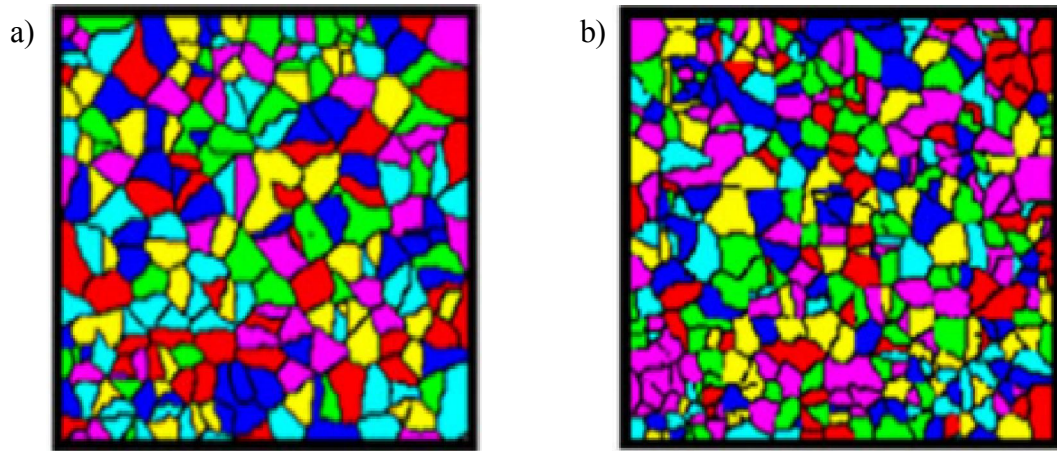


Figura 75.- Distribución de tamaño de grano para muestras de acero de bajo carbono reducidas a: a) 15% y b) 30% seguido de un tratamiento isotérmico a 600°C, tomado de la referencia [90].

El porcentaje de error de la fracción recrystalizada utilizando el modelo JMAK disminuyó al aumentar la reducción, esto puede ser debido al comportamiento del exponente  $n$  en la ecuación (5.21). Como se demostró en la sección 5.4.1,  $n$  se encuentra en un rango entre 1 y 3, por lo que valores de  $n=0.588$  y  $n=0.797$ , que corresponden a las reducciones de 10% y 35%, respectivamente, no capturarían adecuadamente la cinética de recrystalización lo que indica que no es recomendable utilizar el modelo JMAK cuando  $n$  sea menor a 1. Se ha reportado en la literatura que valores de  $n$  entre 1 y 2 representan una nucleación en las fronteras de grano [36,93].

En el método AC se encontró la siguiente limitante:

Se utilizaron probabilidades de nucleación a prueba y error para poder obtener las microestructuras simuladas, ya que la referencia [71] recomienda utilizar un valor de 0.01 es decir, de cada 100 sitios solo 1 es capaz de nuclear un nuevo grano, sin embargo, dicha probabilidad no generó los resultados de microestructura esperados. Las probabilidades utilizadas se muestran en la Tabla 9.2. Un ajuste en estas probabilidades de nucleación ayudaría a reducir el porcentaje de error en el cálculo del tamaño de grano utilizando AC.

Tabla 9.2.- Probabilidades de nucleación consideradas en los modelos de compresión en frío.

% reducción	Probabilidad de nucleación
10	0.00015
35	0.018
70	0.09

Recordando en la sección 5.4, el método JMAK considera una nucleación homogénea, es decir que todos los sitios tienen la misma probabilidad de generar núcleos para la recristalización, mientras que en el método AC, al aumentar la deformación se produce una mayor cantidad de dislocaciones y una energía mayor almacenada que resultarán en una mayor cantidad de sitios para la nucleación, aumentando su probabilidad de nucleación (ver ecuación 6.66) siendo en este caso en las fronteras de grano, detalle no considerado en el modelo JMAK y por lo tanto el aumento en el porcentaje de error de este modelo al aumentar la reducción.

De la Tabla 8.4, para reducciones pequeñas, se recomendaría utilizar el modelo JMAK y para reducciones mayores a 70% utilizar el método AC.

En base a lo discutido en las referencias [78] y [88] se podrían reducir los porcentajes de error si se tomara en cuenta el efecto de la formación de textura durante la deformación, que afectará esencialmente al comportamiento de la recristalización. Por ejemplo, en la referencia [78] se estudió el efecto de la desorientación en el crecimiento de grano. La Figura 76 muestra el área de los granos recristalizados en función del tiempo (pasos de Monte-Carlo, MCS) considerando diferentes orientaciones entre la matriz y los granos recristalizados.

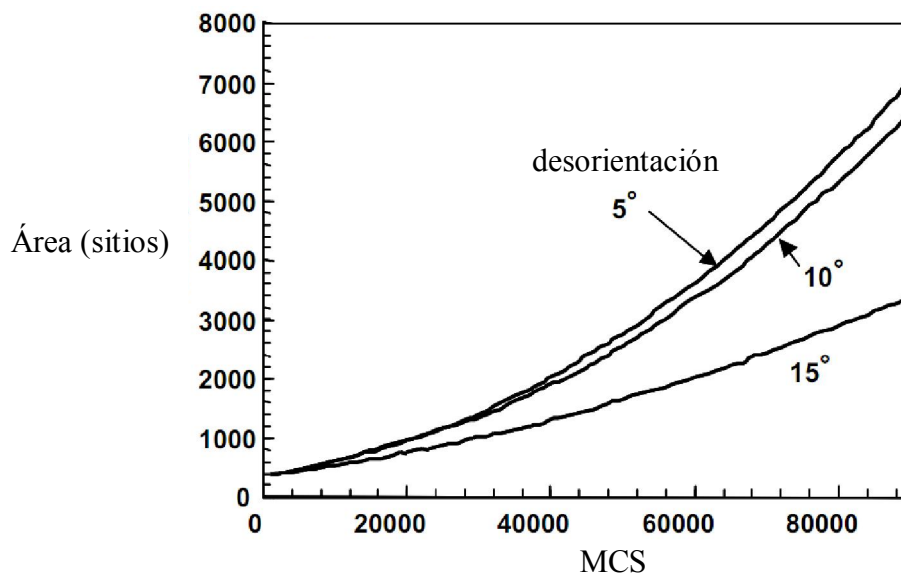


Figura 76.- Área de los granos recristalizados con el tiempo [78].

Cabe notar que los modelos generados se han enfocado a una sola temperatura de recocido de 800°C después la compresión, por lo que sería recomendable generar modelos a otras temperaturas.

Se puede variar la temperatura de recocido y el tiempo del tratamiento, a una mayor temperatura y tiempo de recocido aumentaría el tamaño de grano [85], sin embargo, en este trabajo solo se estudió el efecto de la reducción sobre la evolución microestructural y se hizo la comparación entre el modelo JMAK y el de autómatas celulares, lo que abre la puerta futuros trabajos de investigación.

### 9.3. Modelos de laminación en caliente

Para los modelos JMAK y AC se calcularon coeficientes a partir de datos de pruebas experimentales obtenidos de la literatura que ayudaron a predecir la cinética de recristalización y los tamaños de grano recristalizado. Dichos coeficientes no han sido reportados en literatura para los aceros considerados. En base a lo anterior, se pudo reproducir la cinética de recristalización estática mediante el modelo JMAK para los



materiales A2 y A3 a excepción de fracciones recrystalizadas después del 95% donde el paquete de simulación muestra un brinco de valor hasta el 100% probablemente debido al algoritmo de solución para obtener la convergencia de la solución de la fracción recrystalizada, protegiéndose el sistema principalmente de producir algún valor de infinito, ver ecuación (5.21).

Para el material A2 (material con 2 fases) es evidente la contribución de la austenita en la cinética de recrystalización estática (Figura 69), siendo más rápida en el centro del material que a 1/4 de la superficie, tal como se comentó en la sección 5.6, su mayor contribución se debe principalmente a que tiene mayor resistencia (ver Figuras 39 a la 41) generando así una mayor cantidad de defectos (dislocaciones) en las fronteras de grano que promueven una mayor cantidad de núcleos para la recrystalización. Esta diferencia de tamaños de grano al existir una fase austenítica también se discute en la referencia [88].

Para el caso del material A3 el método AC fue capaz de predecir el crecimiento de grano mientras que el método de JMAK no pudo determinarlo debido al criterio mencionado en la sección 8.3.4.2, es decir, cuando el tamaño de grano recrystalizado es mayor al tamaño inicial de grano, el algoritmo toma nuevamente el tamaño inicial de grano.

Uno de los problemas que se observaron durante el desarrollo de los modelos de laminación en caliente fue que durante el interpase los modelos generados no fueron capaces de calcular la cinética de recrystalización estática, lo cual puede afectar significativamente a los resultados del tamaño de grano recrystalizado. El paquete computacional no fue capaz de modelar el cambio de forma (alargamiento) de los granos durante la laminación el cual se ha reportado que contribuye a la formación de textura [78,85] la cual no fue considerada en los modelos AC. La dependencia de las propiedades magnéticas incluyendo el efecto de la textura se ha reportado en la referencia [94] para aceros con 2.4% y 3% de silicio.

La versión utilizada de DEFORM (10.2) en este trabajo de investigación aún no cuenta con un algoritmo que permita incluir el efecto de la textura. Dicho comportamiento se ha podido modelar en aceros de ultra bajo carbono y aceros aleados con Niobio utilizando la técnica de Monte-Carlo [78]. Cabe mencionar que dicha técnica junto con la de campo de fase aparece en las ventanas del paquete DEFORM, pero sin poderse implementar en la versión actual.

También existe incertidumbre con el origen del factor K de la ecuación (6.66), dicho factor solo ha sido reportado para modelos AC de 400 renglones por 400 columnas [71,75,76,95], pero no se ha mostrado algún fundamento teórico que permita obtener dicho valor para otros tamaños de celda. En este trabajo de investigación se utilizó el mismo valor de K para todos los modelos generados por autómatas celulares.

Se tomaron los datos experimentales de la referencia [88] para obtener la evolución microestructural del acero al silicio con los mismos parámetros de los modelos generados en este trabajo para verificar la validez del mismo. Se modelaron 2 pases de laminación con 30% de reducción cada una laminando el planchón a 1150°C y luego recalentando a una temperatura de 1150°C por 15 minutos.

La comparación de resultados de microestructura se muestra en la Figura 77. En la Figura 77a) el tamaño de grano promedio es de 938.5  $\mu\text{m}$  [88], mientras que en la Figura 77b) es de 620.4  $\mu\text{m}$ , sin embargo el tamaño de grano máximo en la Figura 77b) es de 989.5  $\mu\text{m}$ .

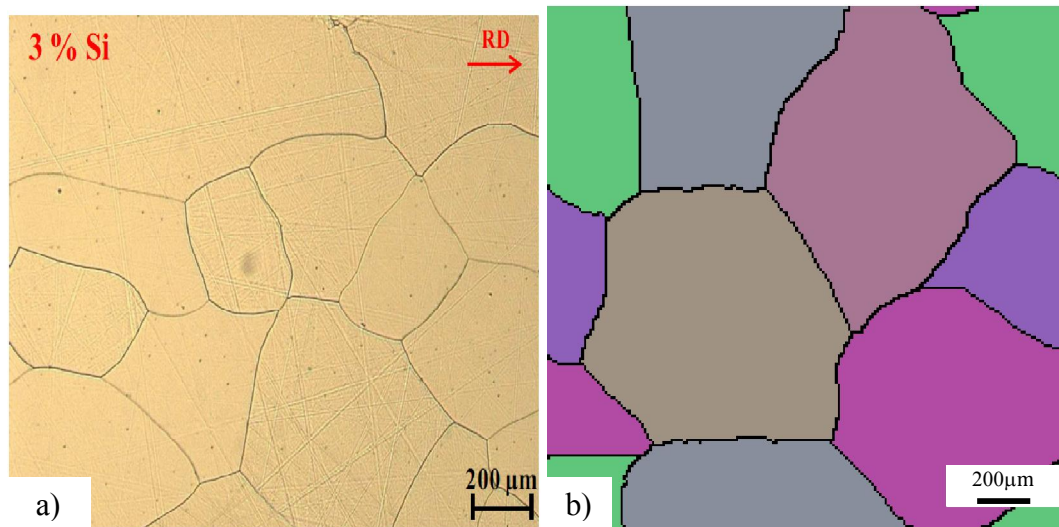


Figura 77.- Comparación de microestructuras para un acero con 3% de silicio, laminado en 2 pases de 30% de reducción cada uno, luego calentado a 1150°C por 15 minutos. a) Microestructura tomada de la referencia [88], b) Microestructura calculada en DEFORM 2D mediante AC.

#### 9.4. Propiedades magnéticas

En los modelos de compresión en frío, el aumento en coercitividad ( $H_c$ ) y en las pérdidas magnéticas están relacionados con la cantidad de dislocaciones generadas, tal como se comentó en la sección 2.4, lo que explica el aumento en dichos valores al aumentar la cantidad de deformación. Dicha tendencia se muestra en las Figuras 78 y 79 en función de la deformación verdadera y concuerda con lo reportado en la literatura [92,96]

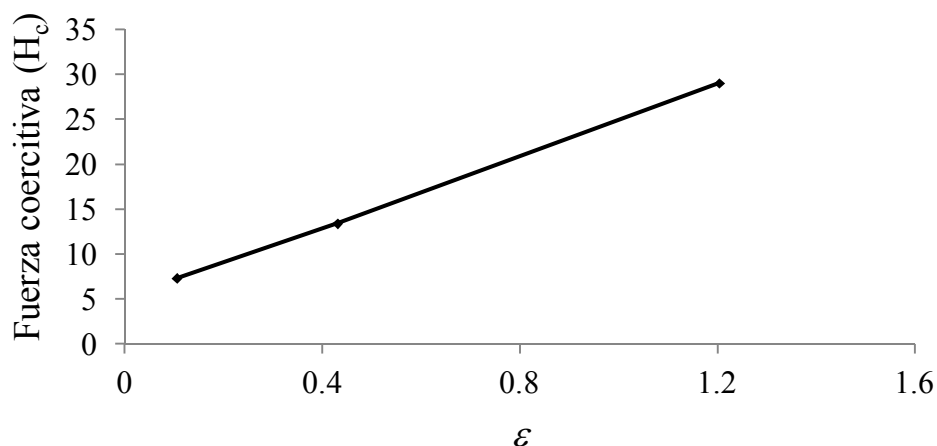


Figura 78.- Fuerza coercitiva en función de la deformación verdadera ( $\epsilon$ ) para los modelos de compresión en frío.

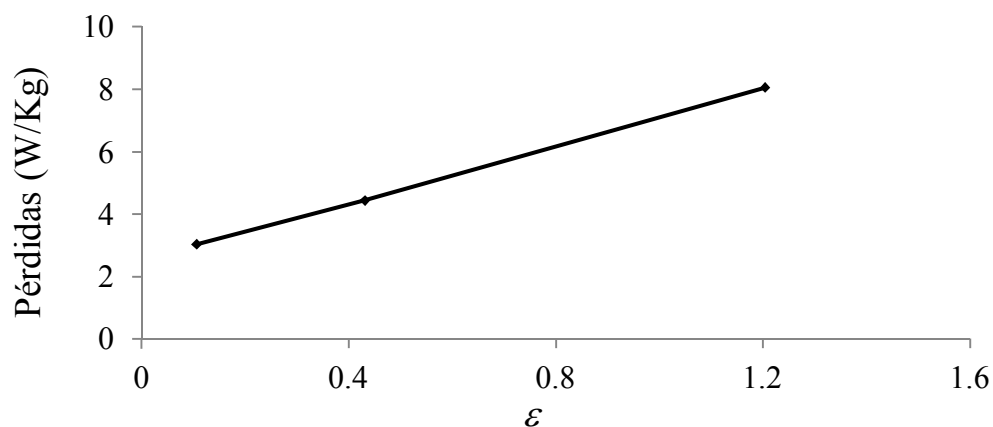


Figura 79.- Pérdidas por histéresis en función de la deformación verdadera ( $\epsilon$ ) para los modelos de compresión en frío.

Las Figuras 80 y 81 muestran las propiedades magnéticas obtenidas experimentalmente para una muestra de acero con 2.2% de Si laminada en frío y luego recocida a 700°C [27]. Aunque en estas figuras el nivel de deformación es un orden de magnitud menor comparados con los de las figuras 78 y 79, se pueden apreciar en promedio las tendencias tanto de la fuerza coercitiva como de las pérdidas por histéresis de aumentar con la deformación.

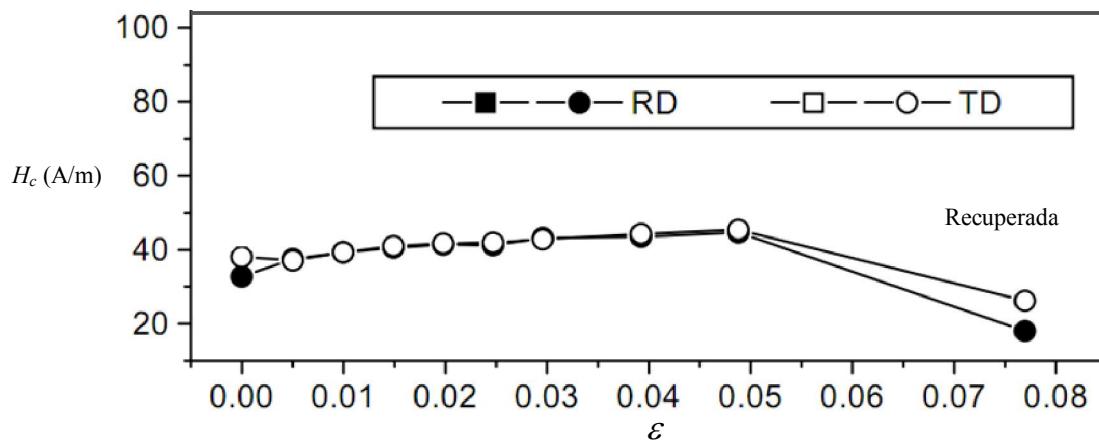


Figura 80.- Fuerza coercitiva en función de la deformación verdadera ( $\epsilon$ ) para muestras de acero con 2.2% de Si laminadas en frío y recocidas a 700°C, obtenidas de la referencia [27]. Nota: RD indica que es paralelo a la dirección de laminación y TD dirección transversal.

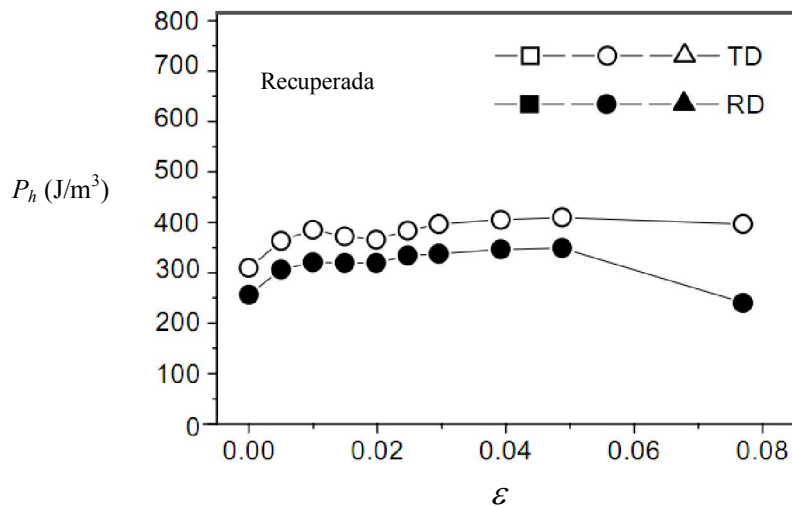


Figura 81.- Pérdidas por histéresis en función de la deformación verdadera ( $\epsilon$ ) para muestras de acero con 2.2% de Si laminadas en frío y recocidas a 700°C, obtenidas de la referencia [27]. Nota: RD indica que es paralelo a la dirección de laminación y TD dirección transversal.

La Figura 82 muestra la permeabilidad en función de la deformación verdadera.

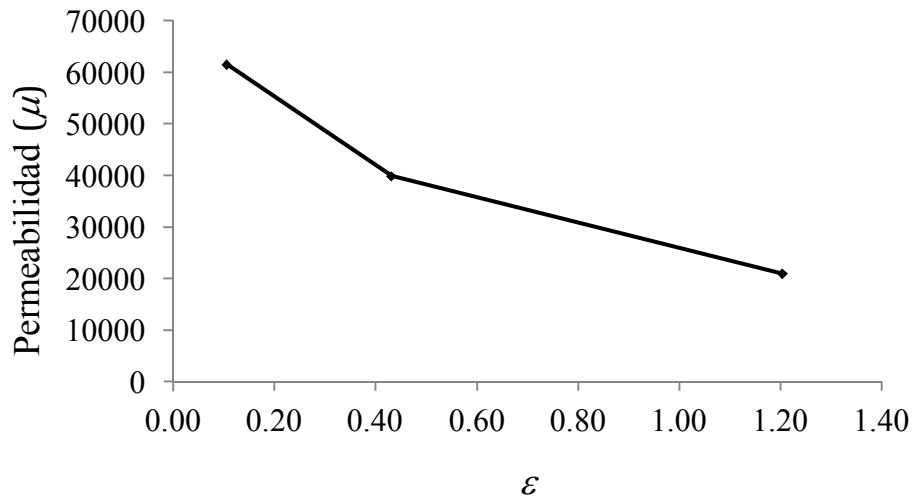


Figura 82.- Permeabilidad en función de la deformación verdadera para los modelos de compresión en frío.

La Figura 83 muestra los resultados experimentales de la permeabilidad tomados de la referencia [27] para muestras de acero con 2.2% de silicio laminadas en frío y luego recocidas a 700°C.

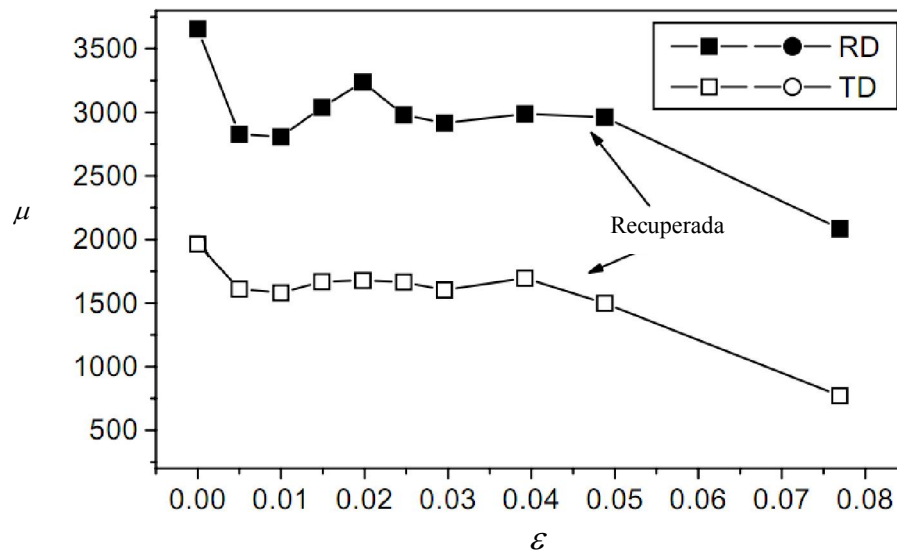


Figura 83.- Permeabilidad en función de la deformación verdadera ( $\epsilon$ ) para muestras de acero con 2.2% de Si laminadas en frío y recocidas a 700°C, obtenidas de la referencia [27]. Nota: RD indica que es paralelo a la dirección de laminación y TD dirección transversal.

El comportamiento de la permeabilidad de la Figura 82 de los modelos de compresión en frío coincide con trabajos de investigación anteriores donde se reportó la tendencia de la permeabilidad de disminuir al aumentar la cantidad de deformación [27,97], ver Figura 83.

En los modelos de laminación en caliente la presencia de austenita fue fundamental ya que produjo una disminución en la permeabilidad y un aumento en la fuerza coercitiva así como en las pérdidas por histéresis.

En resumen, este trabajo ha permitido generar una metodología que permitirá obtener las propiedades magnéticas para aceros eléctricos durante su procesado utilizando técnicas numéricas. Primeramente se procedió a calcular mediante la técnica de elemento finito las temperaturas, esfuerzos, y deformaciones los cuales fueron valores de entrada para la simulación de la evolución microestructural utilizando el método de autómatas celulares y JMAK. Como se mostró en este trabajo de investigación, las propiedades magnéticas se pueden relacionar con parámetros metalúrgicos, principalmente el tamaño de grano.

# **CAPÍTULO 10**

## **CONCLUSIONES Y RECOMENDACIONES**

### **10.1 Introducción**

A continuación se muestran las conclusiones y recomendaciones del presente trabajo de investigación.



## 10.2 Modelos de compresión en frío

Los resultados numéricos de la cinética de recristalización estática concuerdan con los resultados experimentales de la literatura para el modelo JMAK.

Se observó que al aumentar la reducción, el porcentaje de error disminuyó al utilizar el método AC.

Se encontró que al aumentar el porcentaje de reducción en los modelos de compresión en frío resultó en una distribución de mayor temperatura debido a la energía de deformación.

Una mayor cantidad de deformación promovió una mayor fracción recristalizada estáticamente lo cual resultó en un tamaño de grano más pequeño y esto concordó con lo reportado en literatura.

## 10.3 Modelos de laminación en caliente

Los resultados del análisis termo-mecánico para los modelos de laminación en caliente concordaron con los obtenidos con pruebas experimentales de literatura.

Los resultados numéricos permitieron hacer una estimación de las propiedades coincidieron con los reportados en literatura para aceros con composiciones químicas similares.

La cantidad de austenita presente en el acero mejora la fuerza coercitiva pero produce una mayor pérdida por histéresis y aumenta la fuerza coercitiva.

## 10.4 Recomendaciones

Se recomienda realizar más pruebas experimentales que permitan obtener mejores coeficientes para la predicción de las propiedades magnéticas, estas incluyen pruebas de tensión a temperatura ambiente y a altas temperaturas.

Se recomienda realizar análisis que involucren textura ya que las propiedades magnéticas dependen de la orientación cristalográfica y esto permitirá obtener una mejor predicción de dichas propiedades.

Generar modelos que permitan evaluar la cinética de recristalización a diferentes tiempos y temperaturas de recocido.

Este trabajo permitirá generar más conocimiento y generar una mayor aplicación a la simulación numérica para fenómenos de microestructura y su relación con las propiedades magnéticas.

## 10.5 Aportación científica y tecnológica

Se realizó un estudio de la evolución microestructural de aceros al silicio durante un procesado termomecánico utilizando técnicas numéricas de elemento finito y de autómatas celulares. Como contribución en estas áreas se dispone de un modelo numérico que permitirá considerar el efecto variables como el tamaño inicial de grano, deformación y temperatura sobre la microestructura final que ayudará a predecir las propiedades magnéticas más importantes en este tipo de aceros que son la permeabilidad, la coercitividad y las pérdidas por histéresis.

En estos modelos a futuro se podrá incluir el efecto de la textura y se podrán utilizar los datos de éstos en otras técnicas de simulación microestructural como Monte-Carlo y Campos de fase. Este trabajo de investigación ha generado una metodología de modelación y simulación que podrá ser reproducida por otro investigador, lo que

promoverá el uso de dichas herramientas aplicando el método científico y se podrá generar nuevo y mejor conocimiento en este campo.

Desde el punto de vista tecnológico dichos modelos ayudarán al diseño de nuevas rutas de proceso y de tratamientos térmicos para estos aceros mejorando sus propiedades reduciendo costos y tiempos de procesado.

# LISTADO DE IMÁGENES

Figura 1. a) Diagrama metaestable hierro-carbono, b) Región ampliada en la zona de ferrita [2].	7
Figura 2.- Diagrama Fe-Si [3].	8
Figura 3.- Diagrama Fe-Si para aleaciones con 0.01 a 0.02% C [5].	9
Figura 4. Un pastor experimentando una fuerza magnética [7].	10
Figura 5.- Lazo de histéresis.	11
Figura 6. Relación entre el contenido de silicio con la resistividad eléctrica [7].	12
Figura 7. a) Estructura CCC, la dirección [111] es una diagonal del cuerpo, la dirección [110] es una diagonal de una cara y la dirección [100] es el borde de un cubo. b) Magnetización relativa en varias direcciones [7].	14
Figura 8. Dependencia de la orientación cristalina de las pérdidas rotacionales en un acero con 3% de Si [12].	15
Figura 9. Influencia del tamaño de grano en la pérdidas en un acero eléctrico. $P_h$ =Pérdidas de histéresis, $P_a$ = Pérdidas en exceso, $P_{cl}$ =Pérdidas por corrientes parásitas, $P_r$ =Pérdidas totales [20].	18
Figura 10.- Efecto de la deformación verdadera $\epsilon$ en los componentes de pérdida de baja y alta inducción para un acero eléctrico [22].	19
Figura 11.- Curvas de histéresis a diferentes niveles de deformación plástica, $e_p$ [23].	20
Figura 12.- Figuras de polo para un acero eléctrico con 2.4% Si, recocido a: a) 650 °C, b) 700 °C y c) 750°C, [4].	24
Figura 13.- Granos contiguos [30].	25
Figura 14.- Sistemas local (XYZ) y del cristal ([100],[010],[001]), [30].	26
Figura 15.- Ángulos de Euler [30].	27
Figura 16.- Vista tridimensional del espacio de Euler (notación de Bunge) [30].	27
Figura 17.- Distribución de orientación cristalográfica para un acero eléctrico recocido a 1000°C [32].	28
Figura 18.- Textura de Goss.	28
Figura 19.- Clasificación de las transformaciones heterogéneas basadas en los mecanismos de crecimiento [1,36].	35
Figura 20.- Mecanismos de transformación [1,38].	36
Figura 21.- Cantidad de austenita presente en aleaciones Fe-Si a altas temperaturas [5].	41
Figura 22.- Subdivisión granular durante pequeñas deformaciones [35].	43
Figura 23.- Configuraciones de dislocación posibles: a) Arreglo aleatorio de dislocaciones en un cristal flexionado y b) Dislocaciones rearrregladas para formar una frontera de grano [35].	44
Figura 25.- Curvas esfuerzo-deformación verdadera mostrando la recuperación dinámica y la recristalización dinámica.	45
Figura 24.- Etapas en la recuperación de un material deformado plásticamente [39].	45
Figura 26. a) Ilustración esquemática de la migración de la frontera, b) Barrera energética entre granos 1 y 2, [35].	57

Figura 27.- Etapas de la evolución microestructural de un metal: a) Material deformado, b) Después de la recuperación, c) Después de una recristalización parcial, d) Completamente recristalizado, e) Con crecimiento de grano y f) Con crecimiento anormal de grano, [39].	58
Figura 28.- Interacción de los diferentes campos de ingeniería para el estudio de transformaciones de fases en el acero.	67
Figura 29.- Aplicaciones del método de aproximación directa.	72
Figura 30.- Representación esquemática del método de Newton-Raphson.	82
Figura 31.- Definiciones de los vecinos, a) Vecindad de von Neumann, b) Vecindad de Moore y c) Vecindad extendida de Moore [70].	85
Figura 32.- Secciones consecutivas de una material que está recristalizando. Determinado a partir de una simulación 3D de autómatas celulares. El tamaño de la rejilla es de 200x200x200 puntos [77].	90
Figura 33.- Diferentes tipos de redes, a) red cuadrada, b) red rectangular, c) red cúbica [77].	91
Figura 34.- Condiciones frontera utilizadas en el modelo de Potts: a) superficie, b) simetría, c) periódica y d) de tornillo [40,79].	93
Figura 35.- Comportamiento de una variable de campo [70].	94
Figura 36.- Modelo de compresión generado en DEFORM 2D.	100
Figura 37.- Curva esfuerzo deformación verdadera para el material A1, reproducido de [70].	101
Figura 38.- Microestructura inicial para el material A1 modelado en DEFORM 2D.	102
Figura 39.- Curvas esfuerzo-deformación verdadera a diferentes temperaturas y una velocidad de deformación de $0.05s^{-1}$ en función del contenido de austenita.	105
Figura 40.- Curvas esfuerzo-deformación verdadera a diferentes temperaturas y una velocidad de deformación de $0.5s^{-1}$ en función del contenido de austenita.	105
Figura 41.- Curvas esfuerzo-deformación verdadera a diferentes temperaturas y una velocidad de deformación de $5s^{-1}$ en función del contenido de austenita.	106
Figura 42.- Curvas $2\sigma d\sigma/d\varepsilon$ vs $\sigma^2$ para aceros con 3% Si con diferentes contenidos de austenita a $1100^{\circ}C$ y $\dot{\varepsilon}=5s^{-1}$ : a) 0% $\gamma$ , b) 16% $\gamma$ .	107
Figura 43.- Pases de simulación.	108
Figura 44.- Modelo 2D generado en DEFORM para el primer pase de laminación.	109
Figura 45.- Material A2 con diferentes contenidos de austenita.	111
Figura 46.- Tamaño de grano recristalizado para el material A2 en función de: a) Temperatura y b) Tamaño inicial de grano, reproducidas de las referencias [53] y [54].	112
Figura 47.- Dependencia del tiempo para un 30% de transformación para el material A3 en función de: a) temperatura y b) deformación verdadera, reproducidas de la referencia [54].	114
Figura 48.- Dependencia del tamaño de grano recristalizado para el material A3 en función de: a) temperatura y b) deformación verdadera, reproducidas de la referencia [54].	116
Figura 49.- Microestructura inicial para el material A2.	117
Figura 50.- Microestructura inicial para el material A3.	118
Figura 51.- Distribución de temperaturas ( $^{\circ}C$ ) para las pruebas de compresión en frío en función de la reducción: a) 10%, b) 35% y c) 70%.	122

Figura 52.- Distribución de deformación verdadera para la pruebas de compresión en frío en función de la reducción: a) 10%, b) 35% y c) 70%.	123
Figura 53.- Distribución de esfuerzos en función de la reducción a) 10%, b) 35% y c) 70%.	125
Figura 54.- Fracción recristalizada ( $X$ ) en función de la reducción para el material A1.	126
Figura 55.- Distribución de la fracción recristalizada estáticamente, material A1 calentado a 800 °C por 10 minutos y previamente deformado con reducciones de: a) 10%, b) 35% y c) 70%.	127
Figura 56.- Tamaño de grano recristalizado después del calentamiento a 800°C por 10 minutos en función de la reducción, a) 10%, b) 35% y c) 70%.	129
Figura 57.- Microestructura con 10% reducción seguida de un calentamiento a 800°C a: a) 0s, b) 225 s, c) 510s y d)600 s.	130
Figura 58.- Microestructura con 35% reducción seguida de un calentamiento a 800°C a: a) 0 s, b) 30 s, c) 90 s y d) 600 s.	131
Figura 59.- Microestructura con 70% reducción seguida de un calentamiento a 800°C a: a) 0s, b) 30 s, c) 60 s y d) 600 s.	132
Figura 60.- Distribución de temperaturas durante el primer pase (reducción 30%) para el material A2, $t=0.825$ s.	134
Figura 61.- Distribución de temperaturas al final del interpase de 15 segundos para el material A2 después de haber sido reducido 30%.	134
Figura 62.- Distribución de temperaturas durante el segundo pase (reducción 30%) para el material A, $t=16.65$ s.	135
Figura 63.- Evolución térmica durante el proceso de laminación en caliente con 2 pases y un interpase de 15 segundos.	135
Figura 64.- Distribución de deformación verdadera durante el primer pase (material A2), $t=0.88$ s.	136
Figura 65.- Distribución de deformación verdadera durante el segundo pase (material A2), $t=16.65$ s.	136
Figura 66.- Distribución de temperaturas durante el pase de 20% de reducción (material A3), $t=0.6875$ s.	137
Figura 67.- Distribución de deformación verdadera para el material A3 durante el pase de laminación, $t=0.6875$ s.	138
Figura 68.- Distribución de esfuerzos durante el primer pase de laminación ( $t=0.495$ s) para el material: a) A2 (reducción 30%) y b) A3 (reducción 20%).	139
Figura 69.- Cinética de recristalización estática para el material A2, deformado 2 pases con 30% de reducción cada uno y después calentado a 1100°C por 2 minutos.	140
Figura 70.- Distribución de tamaño de grano recristalizado a través del espesor para el material A2 laminado en 2 pases de 30% de reducción a 1100 °C y posteriormente calentado a 1100°C por 25 segundos.	141
Figura 71.- Cinética de recristalización para el material A3 deformado en un pase de laminación a 20% de reducción y después calentado a 1100°C por 20 minutos.	142
Figura 72.- Distribución de tamaño de grano recristalizado para el material A3.	142
Figura 73.- Microestructura simulada mediante autómatas celulares para el material A2, deformado en 2 pases de 30% de reducción y luego calentado a 1100 °C por 20 minutos, a)1/4 del espesor, b)centro.	143

Figura 74.- Microestructura simulada para el material A3.....	144
Figura 75.- Distribución de tamaño de grano para muestras de acero de bajo carbono reducidas a: a) 15% y b) 30% seguido de un tratamiento isotérmico a 600°C, tomado de la referencia [90]......	150
Figura 76.- Área de los granos recristalizados con el tiempo [78]......	152
Figura 77.- Comparación de microestructuras para un acero con 3% de silicio, laminado en 2 pases de 30% de reducción cada uno, luego calentado a 1150°C por 15 minutos. a) Microestructura tomada de la referencia [88], b) Microestructura calculada en DEFORM 2D mediante AC. ....	155
Figura 78.- Fuerza coercitiva en función de la deformación verdadera ( $\epsilon$ ) para los modelos de compresión en frío. ....	156
Figura 79.- Pérdidas por histéresis en función de la deformación verdadera ( $\epsilon$ ) para los modelos de compresión en frío. ....	156
Figura 80.- Fuerza coercitiva en función de la deformación verdadera ( $\epsilon$ ) para muestras de acero con 2.2% de Si laminadas en frío y recocidas a 700°C, obtenidas de la referencia [27]. Nota: RD indica que es paralelo a la dirección de laminación y TD dirección transversal.....	157
Figura 81.- Pérdidas por histéresis en función de la deformación verdadera ( $\epsilon$ ) para muestras de acero con 2.2% de Si laminadas en frío y recocidas a 700°C, obtenidas de la referencia [27]. Nota: RD indica que es paralelo a la dirección de laminación y TD dirección transversal.....	157
Figura 82.- Permeabilidad en función de la deformación verdadera para los modelos de compresión en frío. ....	158
Figura 83.- Permeabilidad en función de la deformación verdadera ( $\epsilon$ ) para muestras de acero con 2.2% de Si laminadas en frío y recocidas a 700°C, obtenidas de la referencia [27]. Nota: RD indica que es paralelo a la dirección de laminación y TD dirección transversal. ....	158

# LISTADO DE SÍMBOLOS

## A

$A$  Área transversal

## B

$b$  Vector de Burgers.

$B$  Inducción magnética

## C

$c_i$  Parámetros indeterminados

$c_p$  Calor específico a presión constante

$C$  Matriz de capacitancia

## D

$d$  Tamaño de grano

$d_o$  Tamaño inicial de grano

$d_{rex}$  Tamaño de grano recristalizado

## E

$E_{almacenada}$  Energía almacenada

## F

$f$  Fracción recristalizada seleccionada

## G

$G$  Módulo de corte

## H

$h$  Coeficiente de endurecimiento

$H_c$  Fuerza coercitiva

## I

$I$  Corriente eléctrica



**J**

$J$  Flujo atómico

**K**

$k$  Conductividad térmica

$k$  Constante en el modelo JMAK

$K$  Matriz de rigidez

**M**

$m$  movilidad de la frontera de grano

$M$  Factor de Taylor

**N**

$N$  Número de núcleos

$\dot{N}$  Velocidad de nucleación

$n$  Exponente de JMAK

$Nu$  Número de Nusselt

**P**

$P_h$  Pérdida por histéresis

$P_N$  Probabilidad de nucleación

$P_G$  Probabilidad de crecimiento

$Pr$  Número de Prandtl

**Q**

$Q$  Energía de activación

$Q$  Flujo de calor

**R**

$R$  Resistencia eléctrica

$R$  Constante de los gases

$r$  Parámetro de recuperación

$Ra$  Número de Rayleigh

**T**

$T$  Temperatura

$t_R$  Tiempo para una fracción recristalizada  $R$

$t$  Tiempo

**V**

$V$  Voltaje

$v$  Velocidad de migración de la frontera de grano

**X**

$X$  Fracción recristalizada

**Z**

$Z$  Parámetro de Zener-Hollomon

**Símbolos griegos**

$\rho$  Densidad de dislocaciones

$\varepsilon$  Deformación verdadera

$\varepsilon_c$  Deformación crítica

$\varepsilon_p$  Deformación correspondiente al esfuerzo máximo de fluencia

$\dot{\varepsilon}$  Velocidad de deformación

$\sigma_{ij}$  Tensor de esfuerzos

$\sigma_e$  Esfuerzo de cedencia

$\sigma_\infty$  Saturación del esfuerzo

$\mu$  Permeabilidad

$\tau$  Tiempo de incubación para la nucleación

## GLOSARIO

1. **Aliviado de esfuerzos:** se calienta a una temperatura conveniente, manteniendo lo suficiente para reducir los esfuerzos residuales, y luego se enfría lentamente para minimizar la formación de nuevos esfuerzos residuales.
2. **Corriente parásitas:** llamadas también corrientes de eddy se origina cuando un conductor se expone a un campo magnético variable debido al movimiento relativo de la fuente del campo y el conductor o debido a variaciones del campo con el tiempo. Esto causa un flujo de electrones, o corriente dentro del cuerpo del conductor. Estas corrientes crean un campo magnético inducido que se opone al cambio del campo magnético original debido a la ley de Lenz, causando fuerzas de repulsión entre el conductor y el magneto. Mientras sea mayor el campo magnético aplicado, o mayor la conductividad eléctrica del conductor, entonces se desarrollarán mayores corrientes y por lo tanto mayor el campo opuesto. Las corrientes de eddy generan calor así como fuerzas electromagnéticas.
3. **Crecimiento de grano:** ocurre antes de que ocurra la recristalización o después de que ésta haya ocurrido. La fuerza motriz es la reducción de la energía de las fronteras de grano.
4. **Envejecimiento magnético:** decremento de las propiedades magnéticas en función del tiempo.
5. **Fuerza coercitiva:** fuerza requerida para remover el magnetismo residual en el material (punto c en la Figura 5).
6. **Magnetostricción:** distorsión de la red cristalina debido a los cambios magnéticos.
7. **Normalizado:** se calienta una aleación ferrosa a una temperatura conveniente arriba del rango de transformación y se enfría en aire a una temperatura substancialmente abajo del rango de transformación.
8. **Permeabilidad:** grado de magnetización de un material en respuesta a un campo magnético.

9. **Recocido:** término genérico para indicar un tratamiento, que consiste de un calentamiento y se mantiene a una temperatura conveniente seguido de un enfriamiento a una velocidad conveniente, utilizado principalmente para ablandar materiales metálicos. En las aleaciones ferrosas, el recocido usualmente se hace arriba de la temperatura crítica superior aunque los ciclos de tiempo-temperatura varían ampliamente tanto para la máxima temperatura como en la velocidad de enfriamiento utilizados.
10. **Recristalización dinámica:** ocurre durante la deformación y cuando la deformación excede un valor crítico. La fuerza motriz es la remoción de dislocaciones.
11. **Recristalización estática:** ocurre antes de la deformación y cuando la deformación es menor que un valor crítico. La fuerza motriz es la remoción de dislocaciones. La recristalización comienza en un ambiente libre de núcleos.
12. **Recristalización metadinámica:** ocurre después de la deformación y cuando la deformación es mayor a un valor crítico. La fuerza motriz es la remoción de dislocaciones. Debido a que la deformación ha excedido un valor crítico, se han formado núcleos de recristalización en el material, por lo que los comportamientos de la recristalización son diferentes a aquellos en los que no hay núcleos (recristalización estática).
13. **Revenido:** se recalienta el acero endurecido o hierro fundido endurecido a una temperatura debajo de la temperatura eutectoide para reducir la dureza e incrementar la tenacidad.
14. **Templado:** se realiza un enfriamiento rápido cuyo propósito es el control de la microestructura y los productos de las fases. Se predice dureza, fracción volumétrica de la estructura metálica, distorsión y contenido de carbono. Se tienen modelos especializados para la termofluencia, transformación de fases, dureza y difusión. Se pueden introducir datos de la prueba Jominy para predecir la distribución de la dureza del producto final. Se pueden modelar fases múltiples en el material, cada una con sus propiedades elásticas, plásticas, térmicas y de dureza.

# REFERENCIAS

1. G. E. Totten (2006), Steel heat treatment, Metallurgy and Technologies, CRC.
2. G. Krauss (2005), Steel: Processing, Structure, and Performance, ASM International.
3. American Society for Metals (1992), ASM Handbook, Volume 3, Alloy Phase Diagrams, ASM International.
4. D. Moseley, Y. Hu, V. Randle, T. Irons (2005), Role of silicon content and final annealing temperature on microtexture and microstructure development in non-oriented silicon steel, Materials Science and Engineering A 392, pp. 282-291.
5. S. Akta, G. J. Richardson y C. M. Sellars (2005), Hot Deformation and Recrystallization of 3% Silicon Steel Part 1: Microstructure, Flow Stress and Recrystallization Characteristics, ISIJ International, Vol. 45, No. 11, pp. 1666-1675.
6. J. Munro (2008), The story of electricity, IndyPublish.
7. P. Philip Beckley (2002), Electrical steels for rotating machines, Institution of Electrical Engineers.
8. Brailsford (2001), Physical principles of magnetism, Wiley.
9. R. M. Bozorth (2003), Ferromagnetism, Wiley.
10. M. F. Littmann (1971), Iron and Silicon-Iron Alloys. IEEE Transactions on Magnetics, Vol. Mag-7, No. 1, pp. 48-60.
11. F. Asmuss, R. Boll, D. Ganz y F. Pfeifer (1957), Cube-textured iron-silicon alloys, pt. I: magnetic studies, Z. Metallk, vol. 48, pp. 341-343.
12. H. Shimanaka, Y. Ito, K. Matsumura y B. Fukuda (1982), Recent development of Non-Oriented electrical steel sheets, Journal of Magnetism and Magnetic Materials 26, pp. 57-64.
13. A. H. Jahidin, M. S. A. M. Ali y W. N. L. W. Mahadi (2011), Magnetic properties of Grain-oriented and Non-oriented Silicon Iron Core Arrangements, IEEE International Conference on Systems Engineering and Technology (ICSET), pp. 172-176.

14. T. Nozawa, M. Mizogami, H. Mogi, Y. Matsuo (1994), Domain structures and magnetic properties of advanced grain-oriented silicon steel, *Journal of Magnetism and Magnetic Materials* 133, pp. 115-122.
15. K. Jenkins, M. Lindemo (2008), Precipitates in electrical steels, *Journal of Magnetism and Magnetic Materials* 320, pp. 2423-2429.
16. S. K. Chang (2007), Texture change from primary to secondary recrystallization by hot-band normalizing in grain-oriented silicon steels, *Materials Science and Engineering A* 452-453, pp. 903-908.
17. S. K. Ray (1982), Magnetic ageing characteristics of low silicon electrical steels, *Journal of Magnetism and Magnetic Materials* 28, pp. 44-50.
18. W. C. Leslie y G. C. Rauch, Precipitation of Carbides in Low-Carbon Fe-Al-C alloys (1978), *Metallurgical and Materials Transactions A*, Volume 9, Number 3, pp. 343-349.
19. Y. Zhang, Y. Xu, H. Lu, C. Li, G. Cao, Z. Liu y G. Wang (2012), Microstructure, texture and magnetic properties of strip-cast 1.3% Si non-oriented electrical steels, *Journal of Magnetism and Magnetic Materials* 324, pp. 3328-3333.
20. M. F. de Campos, J. C. Teixeira y F. J. G. Landgraf (2006), The optimum grain size for minimizing energy losses in iron, *Journal of Magnetism and Magnetic Materials* 301, pp. 94-99.
21. D. L. Rodrigues, J. R. F. Silveira, G. J. L. Gerhardt, F. P. Missel, F. J. G. Landgraf, R. Machado y M. F. de Campos (2012), Effect of Plastic Deformation on the Excess Loss of Electrical Steel, *IEEE Transactions on Magnetics*, Vol. 48, No. 4, pp. 1425-1428.
22. F. J. G. Landgraf, M. Emura, K. Ito, P. S. G. Carvalho (2000), Effect of plastic deformation on the magnetic properties of non-oriented electrical steels, *Journal of Magnetism and Magnetic Materials* 215-216, pp. 95-96.
23. M. J. Sablik, S. Rios, F. J. G. Landgraf, T. Yonamine, M. F. de Campos (2005), Modeling of sharp change in magnetic hysteresis behavior of electrical steel at small plastic deformation, *Journal of Applied Physics* 97, pp. 10E518-10E518-3.

24. E. Hug, O. Hubert, J. J. Houtte (2002), Effect of internal stresses on the magnetic properties of non-oriented Fe-3wt.% Si and (Fe,Co)-2wt.% V alloys, *Materials Science and Engineering A332*, pp. 193-202.
25. M. J. Sablik, T. Yomamine, F. J. G. Landgraf (2004), Modeling Plastic Deformation Effects in Steel on Hysteresis Loops With the Same Maximum Flux Density, *IEEE Transactions on Magnetics*, Vol. 40, No. 5, pp. 1-8.
26. F. Khodabakhshi y M. Kazeminezhad (2011), The effect of constrained groove pressing on grain size, dislocation density and electrical resistivity of low carbon steel, *Materials and Design* 32, pp. 3280-3286.
27. F. J. G. Landgraf, M. Emura (2002), Loss and permeability improvement by stress relieving fully processed electrical steels with previous small deformations, *Journal of Magnetism and Magnetic Materials* 242, pp. 152-156.
28. Y. Shingaki y S. Okabe (2012), Influence of Crystal Orientation on Magnetic Properties in 3% Silicon Steel With Ultra-High Tension TiN Coating, *IEEE Transactions on Magnetics*, Vol. 48 No. 4, pp. 1469-1472.
29. S. Taguchi, A. Sakakura, F. Matsumoto, K. Takashima y K. Kukori (1975), The development of grain oriented silicon steel with high permeability, *Journal of Magnetism and Magnetic Materials*, Volume 2, pp. 121-131.
30. V. Randle, O. Engler (2000), *Introduction to Texture Analysis. Macrotecture, Microtexture, and Orientation Mapping*, CRC.
31. A. Haldar, S. Suwas y D. Bhattacharjee (2008), *Proceedings of the International Conference on Microstructure and Texture in Steels and Other Materials*, Springer.
32. S. K. Chang (2007), Magnetic Anisotropies and Textures in High-alloyed Non-oriented Electrical Steels, *ISIJ International*, Vol. 47, No. 3, pp. 466-471.
33. W. Guo, W. Mao, Y. Li y Z. An (2011), Influence of intermediate annealing on final Goss texture formation in low temperature reheated Fe-3%Si steel, *Materials Science and Engineering A* 528, pp. 931-934.
34. A. Morawiec, (2011), On abnormal growth of Goss grains in grain-oriented silicon steel, *Scripta Materialia* 64, pp. 466-469.

35. T. A. Bennett (2006), Abnormal grain growth in iron-silicon, Tesis, Carnegie Mellon University.
36. J. W. Christian (2002), Theory of transformations of metals and alloys, Pergamon.
37. J. Agren (2002), On the classification of phase transformation, Scripta Materialia, 46, pp. 893-898, 2002.
38. H. K. D. H. Bhadeshia y R. W. K. Honeycombe (2006), Steels, Microstructure and properties, Butterworth.
39. F. J. Humphreys y M. Hatherly (2004), Recrystallization and related annealing phenomena, Elsevier.
40. American Society for Metals (2010), ASM Handbook, Volume 22A, Fundamentals of Modeling for Metals Processing, ASM International.
41. American Society for Metals (2010), ASM Handbook, Volume 22B, Metals Process Simulation, ASM International.
42. Y. C. Lin, X. Chen (2011), A critical review of experimental results and constitutive descriptions for metals and alloys in hot working, Materials and Design 32, pp. 1733-1759.
43. J. H. Beynon, C. M. Sellars (1992), Modelling Microstructure and Its Effects during Multipass Hot Rolling, ISIJ International, Vol. 32, No. 3, pp. 359-367.
44. C. Zheng, D. Raabe y D. Li (2012), Prediction of post-dynamic austenite-to-ferrite transformation and reverse transformation in a low-carbon steel by cellular automaton modeling, Acta Materialia 60, 4768-4779.
45. C. Schäfer, V. Mohles y G. Gottstein (2011), Modeling of non-isothermal annealing: Interaction of recrystallization, recovery, and precipitation, Acta Materialia 59, pp. 6574-6587.
46. E. A. Jägle y E. J. Mittemeijer (2011), The kinetics of grain-boundary nucleated phase transformations: Simulations and modeling, Acta Materialia 59, pp. 5775-5786.
47. C. M. Sellars (1980), Hot Working and Forming Processes, Ed. The Metal Society, London.



48. J. Kliber, R. Fabík, I. Vitez y K. Drozd (2010), Hot Forming Recrystallization Kinetics in Steel, *Metalurgija* 49, pp. 67-71.
49. L. J. Zhu, D. Wu y X. M. Zhao (2008), Effect of Silicon Addition on Recrystallization and Phase Transformation Behavior of High-Strength Hot-Rolled TRIP Steel, *Acta Metall. Sin. (Engl. Lett.)* Vol. 21 No.3 pp. 163-168.
50. Burke J. E. y D. Turnbull (1952), *Recrystallization and Grain Growth*, Pergamon Press.
51. G. Anan, S. Nakajima, M. Miyahara, S. Nanba, M. Umemoto, A. Hiramatsu, A. Moriya y T. Watanabe (1992), A Model for Recovery and Recrystallization of Hot Deformed Austenite Considering Structural Heterogeneity, *ISIJ International*, Vol. 32, No. 3, pp. 261-266.
52. SFTC (2009), *DEFORM 3D v10 Users Manual*, Scientific Forming Technologies Corporation.
53. S. Akta, G. J. Richardson y C. M. Sellars (2005), Hot Deformation and Recrystallization of 3% Silicon Steel Part 2: Effect of Microstructural Variables on Static Recrystallization, *ISIJ International*, Vol. 45, No. 11, pp. 1676-1685.
54. S. Akta, G. J. Richardson y C. M. Sellars (2005), Hot Deformation and Recrystallization of 3% Silicon Steel Part 3: Effect of Hot Deformation Variables on Static Recrystallization, *ISIJ International*, Vol. 45, No. 11, pp. 1686-1675.
55. K. T. Kashyap (2001), On the origin of recrystallization textures, *Bull. Mater. Sci.*, Vol. 24, No. 1, pp. 23-26.
56. F.E. Cellier, E. Kofman (2006), *Continuous system simulation*, Springer.
57. A.M Law, W. D. Kelton (1991), *Simulation modeling and analysis*, McGraw Hill.
58. C.F. Gerald (2004), P.O Wheatley, *Applied numerical analysis*, Pearson.
59. Y.A. Cengel (2003), *Heat transfer, a practical approach*, McGraw Hill.
60. S. Serajzadeh (2004), A mathematical model for prediction of austenite phase transformation, *Materials Letters* 58, pp. 1597-1601.
61. S. Kobayashi, S. Oh y T. Altan (1989), *Metal Forming and the Finite-Element Method*, Oxford.

62. G.R. Liu y S. S. Quek (2003), *The finite element method. A practical approach*, Butterworth.
63. K.H. Huebner, E.A. Thornton y T.G. Byrom (1995), *The finite element method for engineers*, Wiley.
64. J.N. Reddy (1993), *An introduction to the finite element method*, McGraw Hill.
65. O.C. Zienkiewicz y R.L. Taylor (2000), *The finite element method, Vol. 1: The basis*, Butterworth.
66. R.W. Lewis, P. Nithiasaru, K.N. Seetharamu (2004), *Fundamentals of the finite element method for heat and fluid flow*, Wiley.
67. M. S. Gockenbach (2006), *Understanding and Implementing the Finite Element Method*, Society for Industrial and Applied Mathematics (SIAM).
68. P. Mukhopadhyay (2005), *Simulation of Primary Recrystallization with Cellular Operator Model*, PhD Thesis.
69. G. E. Dieter, H. A. Kuhn y S. L. Semiatin (2003), *Handbook of Workability and Process Design*, ASM International.
70. D. Raabe, F. Roters, F. Barlar y L. Chen (2004), *Continuum Scale Simulation of Engineering Materials, Fundamentals, Microstructures, Process Applications*, Wiley.
71. SFTC (2009), *Post-Processor Discrete Lattice Microstructure Evolution Modeling in DEFORM-3D*, Scientific Forming Technologies Corporation.
72. X. Queleñec, E. Martin, L. Jiang, J. J. Jonas (2010), *Work hardening and kinetics of dynamic recrystallization in hot deformed austenite*, *Journal of Physics: Conference series* 240 012082, pp. 1-4.
73. N. Yazdipur y P. D. Hodgson (2012), *Modelling post-deformation softening kinetics of 304 austenitic stainless steel using cellular automata*, *Computational Materials Science* 54, pp. 56-65.
74. J. Zhao-yang, L. Juan, C. Zhen-shan y W. Dong-lai (2010), *Identification of nucleation parameter for cellular automaton model of dynamic recrystallization*, *Transactions of Nonferrous Metals Society of China* Vol. 20, pp.458-464.
75. R. L. Goetz y V. Seetharaman (1998), *Modeling Dynamic Recrystallization using Cellular Automata*, *Scripta Materialia*, Vol. 38, No. 3, pp. 405-413.

76. N. Yazdipour, A. Dehghan-Manshadi, C. H. J. Davies y P. D. Hodgson (2007), Simulation of Dynamic Recrystallization Using Irregular Cellular Automata, *Materials Forum* Vol. 31, pp. 164-176.
77. D. Raabe (1998), *Computational Materials Science, The Simulation of Materials, Microstructure and Properties*, Wiley.
78. K. Okuda, A. D. Rollet (2005), Monte Carlo simulation of elongated recrystallized grains in steels. *Computational Materials Science* 34, pp. 264-273.
79. Koenraad G. F. Janssen, Dierk Raabe, Ernst Kozeschnik, Mark A. Miodownik, Britta Nestler (2007), *Computational Materials Engineering, An Introduction to Microstructure Evolution*, Academic Press.
80. P. Peczak (1995), A Monte-Carlo study of influence of deformation temperature on dynamic recrystallization, *Acta Metall. Mater.* vol. 43, pp. 1279-1291.
81. T. Takaki, A. Yamanaka y Y. Tomita (2007), Phase-Field Modeling for Dynamic Recrystallization, *International Conference on Advanced and Trends in Engineering Materials and their Applications (ATEMA)*, pp. 223-231.
82. G. Bozzollo, R. D. Noebe, P. B. Abel (2007), *Applied Computational Materials Modeling, Theory, Simulation and Experiment*, Ed. Springer.
83. S. S. F. de Dafé, S. C. Paolinelli y A. B. Cota (2011), Influence of thermomechanical processing on shear bands formation and magnetic properties of a 3%Si non-oriented electrical steel, *Journal of Magnetism and Magnetic Materials* 323, pp. 3234-3238.
84. A. J. Moses (2012), Energy efficient electrical steels: Magnetic performance prediction and optimization, *Scripta Materialia*, pp. 1-6.
85. P. R. Calvillo (2008), Deformation analysis of high Si-steel by torsion and compression testing, Tesis de doctorado.
86. A. Lassraoui (1990), *Computer Modelling of Temperature, Flow Stress and Microstructure During the Hot Rolling of Steel*, Tesis, McGill University.
87. S. Akta, G. J. Richardson y C. M. Sellars (2005), Hot Deformation and Recrystallization of 3% Silicon Steel Part 4: Effect of Recovery and Partial Recrystallization between Passes on subsequent Recrystallization Behavior, *ISIJ International*, Vol. 45, No. 11, pp. 1696-1702.

88. D. Silva (2012), Laminación en caliente y en frío de aceros al silicio para aplicaciones eléctricas, Tesis de maestría, FIME, UANL.
89. H. Dong, D. Cai, Z. Zhao, Z. Wang, Y. Wang, Q. Yang, B. Liao (2010), Investigation on Static Softening Behaviors of a Low Carbon Steel Under Ferritic Rolling Condition, *Journal of Materials Engineering and Performance*, Volume 19(2), pp. 151-154.
90. E. Afshari y S. Serajzadeh (2011), Simulation of Static Recrystallization After Cold-Side Pressing of Low Carbon Steels Using Cellular Automata, *Journal of Materials Engineering and Performance*.
91. F. J. G. Landgraf, F. B. Neto, D. Rodrigues, G. Concílio, R. L. Plaut (1989), Effect of Annealing on Magnetic Properties of Fe-47.5%Ni Alloy, *J. Mater. Eng.* Vol. 11, No. 1, pp. 45-49.
92. F. J. G. Landgraf, J. R. F. Silveira y D. Rodrigues-Jr. (2011), Determining the effect of grain size and maximum induction upon coercive field of electrical steels, *Journal of Magnetism and Magnetic Materials* 323, pp. 2335-2339.
93. M. Jafari, A. Najafizadeh y J. Rasti (2007), Dynamic Recrystallization by Necklace Mechanism During Hot Deformation of 316 Stainless Steel, *International Journal of ISSI*, Vol. 4, No. 1,2, pp. 16-23.
94. J. J. Sidor, K. Verbeken, E. Gomes, J. Schneider, P. R. Calvillo y L. A. I. Kestens (2012), Through process texture evolution and magnetic properties of High Si non-oriented electrical steels, *Materials Characterization*, pp. 1-28.
95. V. García (2004), Constitutive Relations to Model the Hot Flow of Commercial Purity Copper, Tesis de doctorado, Universidad Politécnica de Cataluña.
96. N. A. Castro, M. F. de Campos, F. J. G. Landgraf (2006), Effect of deformation and annealing on the microstructure and magnetic properties of grain-oriented electrical steels, *Journal of Magnetism and Magnetic Materials* 304, pp. e617-e619.
97. A. Kurc y Z. Stoklosa (2008), Some mechanical and magnetic properties of cold rolled X5CrNi18-8 stainless steel, *Archives of Materials Science and Engineering*, Vol. 34, issue 2, pp. 89-94.

# RESUMEN AUTOBIOGRÁFICO

**Oscar Jesús Zapata Hernández**

Candidato para el grado de Doctorado en Ingeniería de Materiales

Tesis: “Simulación de la evolución microestructural de aceros al silicio durante su deformación en caliente”

Oscar Jesús Zapata Hernández nació en la ciudad de Monterrey N.L. México el 2 de Mayo de 1982. Es hijo del Sr. José Herminio Zapata Niño y la Sra. Minerva Hernández Ramírez.

Cursó sus estudios profesionales en la Facultad de Ingeniería Mecánica y Eléctrica de la Universidad Autónoma de Nuevo León, obteniendo el título de Ingeniero Mecánico Electricista con mención honorífica en el año 2003, posteriormente obtuvo el grado de Maestría en Ciencias de la Ingeniería Mecánica con especialidad en materiales en el año 2007.

En Agosto del año 2007 inició sus estudios de Doctorado en Ciencias de la Ingeniería Mecánica con Especialidad en Materiales, becado por el Consejo Nacional de Ciencia y Tecnología (CONACYT), dentro del Programa Doctoral en Ingeniería de Materiales (PDIM) de esta misma facultad.