



**Análisis computacional de esfuerzos y deformaciones en
función de la microestructura del acero AISI 1045
templado sometido a ensayo de microrayado**

Diego Fernando Pérez Piñeres

Facultad de Ingeniería

Ingeniería Mecánica

Ibagué, 2020



Análisis computacional de esfuerzos en función de la microestructura del acero AISI 1045 templado sometido a ensayo de microrayado

Diego Fernando Pérez Piñeres

Trabajo de grado que se presenta como requisito parcial para optar al título de:
Ingeniero Mecánico

Director (a):
PhD. Eduardo Alberto Pérez Ruiz)
Profesor Universidad de Ibagué

**Facultad de Ingeniería
Ingeniería Mecánica
Ibagué, 2020**



Dedicatoria:

A ese motor de torque infinito, por sus valores y enseñanzas transmitidos desde el inicio de la vida “mamá y papá”.



Agradecimientos

Agradezco a Dios y a mis padres por la ayuda brindada y el apoyo incondicional durante la carrera, al ingeniero y docente Eduardo Alberto Pérez Ruiz de la universidad de Ibagué, por la orientación recibida de parte suya, a lo largo del proceso de la investigación, con el fin de alcanzar los objetivos propuestos en este proyecto. A cada uno de los ingenieros que aportaron parte su conocimiento en las distintas ramas de la ingeniería Mecánica para mi formación profesional y a mis amigos por su apoyo incondicional en las diferentes etapas de este proceso.



Resumen

En este trabajo se estudia la influencia de la microestructura de un acero AISI 1045 templado, conteniendo como principal microconstituyente Bainita, en el comportamiento de los esfuerzos longitudinales (S_{xx} , S_{yy}) máximos principales, Esfuerzo de Von Mises, deformación plástica y deformación equivalente. El modelamiento computacional en 2D, representa las condiciones reales existentes en un ensayo de nano rayado de forma experimental. La creación del mallado en función de la microestructura se realizó en el software OOF2, y posteriormente se crearon las partes restantes que conforman el sistema, mediante el software de elementos finitos ABAQUS. El modelo considera un indentador, propiedades elasto plásticas dentro de los microconstituyentes, variación de cargas y coeficientes de fricción. Los resultados muestran concentradores de esfuerzos en las fronteras de los granos de Bainita superior y Martensita, presentándose fallas por fluencia en el material sobre ciertas regiones del rayado, mayores deformaciones, y esfuerzos normales más significativos en comparación a los cortantes y al sustrato ideal.

Palabras clave: AISI 1045, Microestructura, Esfuerzo, Deformación, Nano rayado OOF2, Abaqus

Abstract

This paper studies the influence of the microstructure of a tempered AISI 1045 steel, containing Bainite as the main microconstituent, in the behavior of the stresses (S_{xx} , S_{yy}), Von Mises stress, plastic strain and equivalent strain. The Computational modeling 2D, represents the conditions in an experimental nano-scratch test way. The creation of the mesh in function of the microstructure is done in the OOF2 software, and then the remaining parts that make up the system, by the finite element ABAQUS software. The model consider indenter, elasto-plastic properties within the microconstituents, and the load variations and friction coefficients. The results show concentrators of stresses on the grains border of Upper Bainite and Martensite, presenting yield failure on the material over some scratch regions, higher strains, and normal stress more significant in comparison to shear stress and the ideal substrate.

Keywords: AISI 1045, microstructure, Stress, Strain, Nano scratch, OOF2, Abaqus



Tabla de contenido

Introducción	1
Capítulo 1: Objetivos	3
1.1 General.....	3
1.1.1 Específicos.....	3
Capítulo 2: Revisión de la literatura	4
Capítulo 3: Materiales y procedimientos	15
3.1 Metalografía y preparación de imagen	15
3.2 Tratamiento de imagen	17
3.3 Creación de mallado en OOF2.....	20
3.4 Creación del modelo en Abaqus.....	22
3.4.1 Modulo de partes	22
3.4.2 Modulo de propiedades mecánicas.....	25
3.4.3 Modulo de ensamblaje.....	30
3.4.4 Modulo de Pasos	31
3.4.5 Modulo condiciones de equilibrio y fuerzas	32
3.4.6 Modulo de trabajo	33
3.5 Convergencia de malla	33
3.5.1 Modelos de mallado.....	34
3.5.2 Selección de la malla.....	36
3.6. Creación del modelo ideal	38
Capítulo 4: Resultados	40
4.1 Efecto de la carga	41
4.2 Efecto del coeficiente de fricción	41
4.3 Efecto del tamaño del indentador	42
4.4 Efecto de la Microestructura	44
4.4.1 Modelos Ideales.....	45
4.4.2 Modelos Reales	48
Capítulo 5: Análisis de Resultados	52
5.1 Análisis de carga.....	52
5.2 Análisis del coeficiente de fricción	53
5.3 Análisis del tamaño del indentador.....	54
5.4 Análisis del efecto de la microestructura	56
5.4.1 Esfuerzo de Von Mises.....	56
5.4.2 Esfuerzo Normal S11(σ_x)	59
5.4.3 Esfuerzo Normal S22 (σ_y)	60
5.4.4 Esfuerzo Máximo principal (σ_{max}).....	61
5.4.5 Esfuerzo Mínimo principal (σ_{min}).....	62
5.4.6 Deformación plástica PE 11 en x	63
Capítulo 6: Conclusiones	65
Bibliografía	66



Anexo A: Código en Matlab.....	70
Anexo B: Graficos complementarios para el modelo real	71
Anexo C: Creación de la malla OOF2	80
Anexo D: Creación de modelo en Abaqus	91



Lista de figuras

	Pág.
Figura 2-1: Efecto del coeficiente de fricción en función de la punta del indentador.....	4
Figura 2-2: Imagen vectorizada poligonal a partir de una imagen binaria rasterizada.	5
Figura 2-3: Abaqus, Modelo computacional en fundición gris	6
Figura 2-4: Metodología y optimización de revestimientos computacionales.....	7
Figura 2-5: Topografía y modelos en materiales de (a) superficies lisas, (b) medias y (c) rugosas.	8
Figura 2-6: Mecanismos básicos de fricción y desgaste	9
Figura 2-7: Modos de falla, grieta propagada a través del espesor	9
Figura 2-8: Análisis microestructural de la desorientación promedio de kernel	10
Figura 2-9: Abaqus Modelo de simulación sobre un sistema de recubrimiento.....	11
Figura 2-10: Formación de las microestructuras de Bainita y Martensita	12
Figura 2-11: (a) Esquema de deformación plástica en microestructura Bainítica, (b) interface del contorno de la martensita y la austenita.....	13
Figura 2-12: Campo de tensión en superficie recubierta como resultado de cuatro cargas	13
Figura 2-13: Abaqus modelo de simulación Acero 1020	14
Figura 3-1-1: Procedimiento para obtener metalografía.....	16
Figura 3-1-2: Metalografía Acero AISI 1045 templado en aceite	17
Figura 3-1-3: Microconstituyentes presentes al interior de la microestructura.....	17
Figura 3-1-4: Microconstituyentes presentes al interior de la microestructura de un acero aleado y un acero de medio carbono.....	18
Figura 3-2-1: Calibración de imagen ImageJ.....	18
Figura 3-2-2: Región de micrografía para el ensayo de nano rayado	19
Figura 3-2-3: Escalas de carga normal utilizada en ensayos de rayado Anton Paar	19
Figura 3-2-4: Longitud de recorrido recomendada en ensayos de nano rayado	19
Figura 3-2-5: Microestructura de blancos y negros calibrada.	21
Figura 3-3-1: Asignación de píxeles en microconstituyentes OOF2.....	21
Figura 3-3-2: Creación de mallado OOF2.....	22
Figura 3-3-3: Mallado por capas OOF2.....	22
Figura 3-3-4: Malla importada desde OOF2 en ABAQUS	23
Figura 3-4-1-1: Abaqus, indentador con radio de 3 μm	24
Figura 3-4-1-2: Comparación de las condiciones de prueba de rayado instrumentada, en escalas crecientes	24
Figura 3-4-1-3: Abaqus, indentador con radio de 1,7 μm	25
Figura 3-4-2-1: Abaqus, microconstituyentes en el sustrato	26
Figura 3-4-2-2-1: Matlab, Curva esfuerzo deformación real para Bainita superior y Martensita	30



Figura 3-4-3-1: Abaqus, ensamble entre indentador y sustrato	30
Figura 3-4-3-2: Esquema de doble punta con terminación semicircular	31
Figura 3-4-5-1: Abaqus, Condiciones de equilibrio	32
Figura 3-4-6-1: Abaqus, Creación de archivo. odb y ejecución de simulación	33
Figura 3-5-1: Corte A-A' Microestructura seleccionada	34
Figura 3-5-1-1: Corte A-A' Microestructura modelos de mallados	34
Figura 3-5-2-1: Esfuerzo de Von Mises vs cantidad de nodos por modelo	36
Figura 3-5-2-2: Tiempo y cantidad de nodos por modelo	37
Figura 3-6-1: Abaqus, Modelo ideal	38
Figura 4-1-1: Simulación I, Esfuerzo de Von Mises vs distancia	40
Figura 4-2-1: Simulación II, Esfuerzo de Von Mises vs distancia	41
Figura 4-3-1: Simulación III, Esfuerzo de Von Mises vs distancia	42
Figura 4-3-2: Simulación IV, Esfuerzo de Von Mises vs distancia	42
Figura 4-4-1-1: Simulación V, Esfuerzo de Von Mises vs Distancia	44
Figura 4-4-1-2: Simulación V, S11 vs Distancia	44
Figura 4-4-1-3: Simulación V, S22 vs Distancia	45
Figura 4-4-1-4: Simulación V, Máximo principal vs Distancia.....	45
Figura 4-4-1-5: Simulación V, Mínimo principal vs Distancia	46
Figura 4-4-1-6: Simulación V, PE (11) vs Distancia.....	46
Figura 4-4-1-7: Simulación V, PEEQ vs Distancia	47
Figura 4-4-2-1: Simulación VI, Esfuerzo de Von Mises vs Distancia	47
Figura 4-4-2-2: Simulación VI, S11 vs Distancia.....	48
Figura 4-4-2-3: Simulación VI, Esfuerzo S22 vs Distancia	48
Figura 4-4-2-4: Simulación VI, Esfuerzo Máximo principal vs Distancia	49
Figura 4-4-2-5: Simulación VI, Esfuerzo Mínimo principal vs Distancia	49
Figura4-4-2-6: Simulación VI, PE (11) vs Distancia.....	50
Figura4-4-2-7: Simulación VI, PEEQ vs Distancia	50
Figura 5-1-1: Efecto de la carga, Esfuerzo de Von Mises vs distancia	51
Figura 5-1-2: Efecto de la carga, PEEQ vs distancia.....	52
Figura 5-2-1: Efecto del coeficiente de fricción, Esfuerzo de Von Mises vs distancia	52
Figura 5-2-2: Efecto de la carga, PEEQ vs distancia.....	53
Figura 5-3-1: Efecto del tamaño del indentador, Esfuerzo de Von Mises vs distancia	54
Figura 5-3-2: Efecto del tamaño en el indentador, Deformación plástica equivalente vs distancia	55



Figura 5-4-1-1: Efecto de la microestructura, Esfuerzo de Von Mises vs Distancia	56
Figura 5-4-1-2: Concentrador de esfuerzos y tensión residual durante el contacto	57
Figura 5-4-1-3: Efecto de la microestructura, Deformación plástica equivalente vs Distancia	58
Figura 5-4-2-1: Efecto de la microestructura, S11 vs Distancia	59
Figura 5-4-3-1: Efecto de la microestructura, S22 vs Distancia	60
Figura 5-4-4-1: Efecto de la microestructura, Esfuerzo máximo principal vs Distancia...	61
Figura 5-4-5-1: Efecto de la microestructura, Esfuerzo mínimo principal vs Distancia....	62
Figura 5-4-6-1: Efecto de la microestructura, PE (11) vs Distancia	63
Figura 5-4-6-2: Efecto de la microestructura, PE (12) vs Distancia	63



Lista de tablas

	Pág.
Tabla 3-4-2-1: Propiedades mecánicas de la Bainita superior y Martensita	26
Tabla 3-4-2-1-1: Valores esfuerzo vs deformación en la region plastica de la Bainita superior	28
Tabla 3-4-2-2-1: Valores esfuerzo vs deformación en la región plástica de la Martensita	29
Tabla 3-4-4-1: Abaqus, Modulo de pasos	31
Tabla 3-5-1-1: Modelos y elementos de la malla.....	35
Tabla 3-5-1-2: Modelos y convergencia de la malla.....	36
Tabla 3-5-2-1: Especificaciones del equipo de procesamiento	36
Tabla 4-1: Parámetros de evaluación en los modelos reales	39
Tabla 4-1-1: Parámetros de evaluación en los sustratos reales e ideales	43



Introducción

El tratamiento térmico en los aceros, ayuda a el mejoramiento de las propiedades mecánicas en los materiales, permitiéndoles adaptarse a ciertas condiciones de trabajo, en función de la aplicabilidad requerida por el entorno [1]. Existen diferentes tipos de microconstituyentes, con ciertas características específicas en su comportamiento mecánico, las cuales son variables dependientes del tipo de tratamiento térmico a diseñar. Es entonces, donde se establecen relaciones entre el tiempo de calentamiento del acero, tiempo de sostenimiento, tiempo de enfriamiento y su medio requerido para lograr unos factores diferenciadores en sus propiedades mecánicas finales (Diseño de tratamiento térmico).

La Bainita es una microestructura con fragilidad relativamente baja, y una dureza promedio alta, en comparación con los demás microconstituyentes presentes en los aceros de medio carbono, lo que genera un interés particular a nivel de estudio de las microestructuras, para lo que concierne al comportamiento de sus esfuerzos y deformaciones. [2],

El modelamiento por simulación computacional, orientado a elementos finitos, identifica las variables necesarias en la realización de los ensayos de rayado de forma experimental, y toma estos parámetros como argumentos de entrada, con el objetivo de retroalimentar al software (Abaqus), para que este a partir de un archivo de salida .odb reproduzca mediante el modelamiento creado de los fenómenos que se pueden presentar como consecuencia del contacto entre los cuerpos (Indentador - sustrato).

Estos argumentos de entradas o variables a tener en cuenta para el ensayo de micro rayado, son obtenidos de la norma ASTM C1624 [3], la cual tiene como objetivo principal parametrizar el procedimiento del ensayo a escala micro métrica en sustratos de materiales cerámicos, metales y en compuestos.

El desarrollo de la prueba en micro rayado está condicionado a una geometría y a un material, este deberá de ser tipo cónico y con punta de diamante, sus ángulos están respectivamente en un rango de (60- 90) grados, su terminación es en punta esférica y su radio varia de 3-20 μm [4]. Las magnitudes físicas como velocidad y carga se pueden presentar bajo un régimen constante en una primera instancia, al evaluar esfuerzos y deformaciones sobre el sustrato, pero también en algunos estudios, es necesario tener en cuenta la afectación que sufre la superficie esclava (material indentado), como consecuencia del incremento de la carga a lo largo de la superficie de rayado, es por ello que se presentan ensayos con cargas progresivas, o continuas. Los parámetros que están en función del desgaste adhesivo, se relacionan intrínsecamente con las propiedades elasto plástica de los materiales, la rugosidad de la superficie, y la microestructura.

El estudio de los esfuerzos equivalentes, las deformaciones en planos longitudinales, y la penetración del indentador, corresponden a fenómenos que tienen una mayor simplicidad de ser calculados bajo simulaciones, y permite de igual manera, contrastarse con lo que se obtiene experimentalmente



OOF2 es un software desarrollado por el MIT, para el estudio de microestructuras en materiales metálicos bifásicos, en donde se pueden crear mallados mediante el rastreo de píxeles en función de las morfologías y tonalidades particulares de cada una de las fases de un material, asignando un grupo de píxeles predeterminado, para la distinción de los microconstituyentes existentes.

Las mallas de las microestructuras correspondientes a un material, están conformadas por uniones entre segmentos que forman una interconexión de nodos, generando como fase final figuras geométricas regulares o irregulares en los tratamientos de imagen. Su función principal es la recolección de información en los micro constituyentes utilizando métodos numéricos, como sistemas de solución cuadráticos, lineales bilineales y no lineales, durante el contacto entre indentador sustrato. Estos datos recolectados a lo largo del rayado son entregados por las grafica del comportamiento o valor real de esfuerzos y deformaciones en el material, a lo largo del ensayo de rayado [5].

Los elementos finitos considerados de forma predeterminada por el software (OOF2) pertenecen a figuras geométricas como triángulos conectados por 3 nodos, cuadriláteros de 4 nodos, triángulos sub paramétricos de 6 Nodos y cuadriláteros paramétricos de 8 Nodos. Su refinamiento en la generación del mallado permite combinar estos elementos como requerimientos necesarios para delimitar la microestructura.

En este mismo orden de ideas, para cualquier elemento extra que se requiera agregar en el software, se recomienda utilizar lenguajes como C++ y Python, dada su compatibilidad con archivos de salidas que se pueden importar dentro Abaqus en formato. inp.

De igual manera, el software presenta por medio de la aplicación del método de elementos finitos, la solución de problemas por modelación de fenómenos de transferencia de calor, balances de masa, conductividad térmica, piezoelectricidad, expansión térmica y elasto plasticidad en materiales metálicos [6]

Por otro lado, Abaqus es un software de diseño que aplica el método de elementos finitos como solución a problemas estáticos, o dinámicos, permitiendo modelar mediante un sistema de mallado, el cálculo de valores cuantitativos entregados por los elementos finitos desde OOF2. La parametrización de propiedades correspondiente al indentador -sustrato, entregan como argumentos de salida, el mapeo de esfuerzos, deformaciones, y cargas críticas sobre diferentes puntos, en el transcurso del rayado. [7].

En la actualidad el avance por modelación computacional del rayado, recolecta mayor cantidad de datos comprimidos en archivos elocuentes a el fenómeno representativo en diversos tipos de desgastes, disminuyendo de esta manera, el tiempo de adquisición de datos, tomados manualmente con equipos de laboratorios en ensayos tribológicos, y logrando simular los mismos fenómenos experimentales presentes con mayor efectividad. Para ello, se debe comprender en una fase inicial la forma de alimentar el modelo computacional, a partir de las normas que rigen estos ensayos, para garantizar confiabilidad en la modelación computacional de los fenómenos acontecidos, y a su vez para tener un mejor control de lo ocurrido con el material [8] .

Capítulo 1: Objetivos

1.1 General

- Analizar mediante simulación computacional el comportamiento mecánico del acero 1045, conteniendo como principal microconstituyente Bainita.

1.1.1 Específicos

- Desarrollar un modelo de simulación computacional, que permita estudiar el efecto de: la carga normal, el coeficiente de fricción y geometría del indentador en un ensayo de micro rayado.
- Simular y analizar el efecto de la microestructura en el desarrollo de los esfuerzos S_{11} , S_{22} , máximos principales, y equivalentes (Mises) durante el micro rayado.
- Simular y analizar el efecto de la microestructura en el comportamiento de la deformación plástica y la deformación equivalente durante el micro rayado

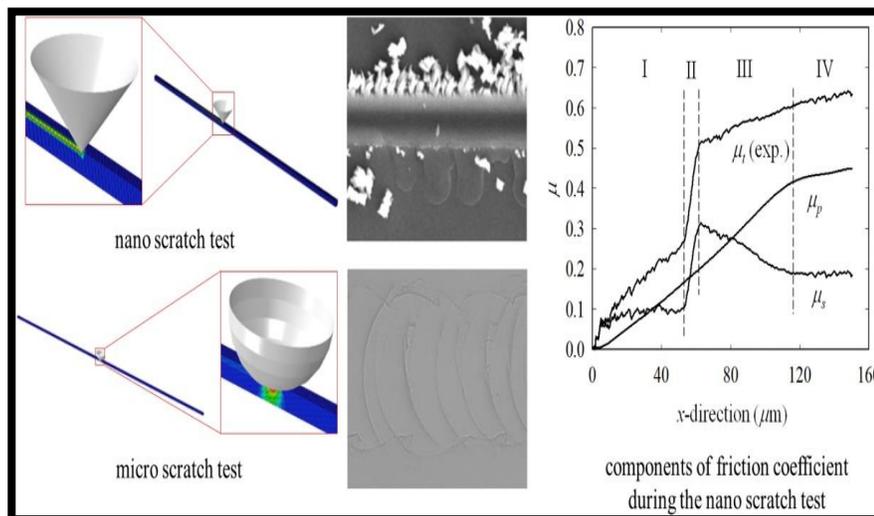
Capítulo 2: Revisión de la literatura

El contacto entre dos cuerpos por deslizamiento relativo en sentidos opuestos, crean un fenómeno conocido como fricción, su problemática radica en el deterioro de los cuerpos, y la disminución de la vida útil de los equipos, a consecuencia de las fallas en un sin número de máquinas como consecuencia de cargas cíclicas presentes por contacto durante el funcionamiento.

Las herramientas computacionales y específicamente el método de simulación por elementos finitos, permite llevar a cabo la modelación de fenómenos que se presentan durante el ensayo de rayado entre dos cuerpos con diferentes propiedades mecánicas.

En este mismo sentido, ABAQUS es un software que permite estudiar fenómenos tribológicos y de indentación, bajo dos tipos de carga en el plano 2D, correspondientes a carga normal y carga cortante, durante el contacto indentador sustrato y su variación en el coeficiente de fricción, como se puede observar en primera instancia en la figura 2-1.

Figura 2-1: Efecto del coeficiente de fricción en función de la punta del indentador



Fuente: Tribology international; Scratch-tip-size effect and change of friction [9]

Por las consideraciones anteriores, el análisis por medio de elementos finito se ha convertido en una herramienta ingenieril significativa por su multifuncionalidad en las diferentes ramas de la mecánica, estableciendo una mayor eficiencia a la hora calcular y relacionar esfuerzos, deformaciones, cargas cíclicas, térmicas entre otras. La correlación de los mecanismos tribológicos y de fractura existentes durante la realización del proceso de modelación, permiten llegar a soluciones de problemas complejos, mediante la implementación de modelos más simples como lo son los modelos de métodos numéricos. Las investigaciones en estas últimas dos décadas, traen a coalición ciertos grupos de investigadores que han estudiado estas variables presentes en los ensayos de rayado para su posterior modelación a nivel computacional. El primer autor a mencionar es K. Padian [9] quien analiza los mecanismos de fallas presentes en un vidrio de soda y lima mediante ABAQUS, haciendo uso del método de elementos finitos, empleando variación en el coeficiente de fricción, recuperación elástica del material y esfuerzos cortantes.

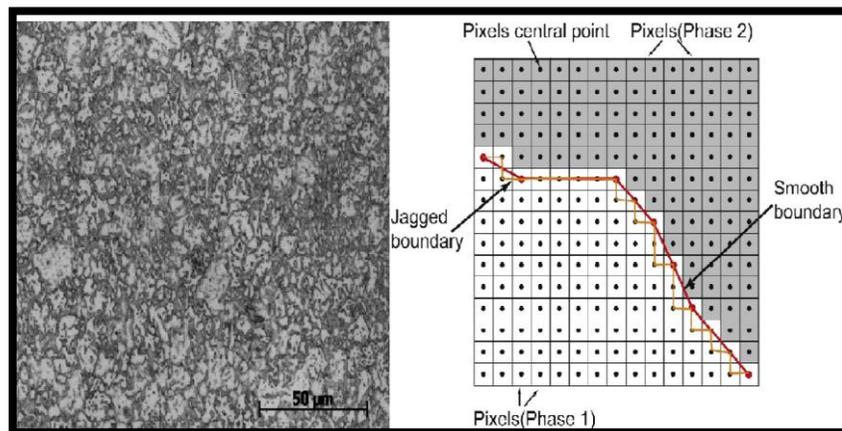


Los resultados muestran fractura dúctil como modo de falla sin afectar la deformación plástica. No obstante, el astillado presente en el material puede aumentar abruptamente en cuestión de segundos, generando la falla por completo en el sustrato.

Siendo consecuente con lo anterior, de momento se ha citado investigaciones basadas en el ensayo de rayado en sustrato cerámicos. En contraste, existen modelos de simulación computacional para otras familias de materiales (metales, compuestos) que entregan al igual que para el caso anterior, ciertos datos que no son de fácil adquisición durante el ensayo de forma experimental, referentes a la profundidad de penetración por parte del indentador, el mapeo de esfuerzos en cada punto del contacto, y la carga progresiva.

Es por esta razón, que es importante resaltar ciertos autores que han realizado estudios basados en modelos matemáticos bajo simulación con herramienta computacional en aleaciones ferrosas. Uno de ellos es JimingZhou [10] el cual se encarga de crear un modelo de simulación para un acero de doble fase (DP) de medio carbono, conteniendo como microestructuras, Martensita y Ferrita. Este procedimiento es realizado bajo la creación de un mallado de tipo poligonal (ver figura 2-2), y tiene como fin, encontrar la correlación de esfuerzos en función de la deformación obtenida, a partir de los valores entregados por los microconstituyentes existentes en el acero.

Figura 2-2: Imagen poligonal vectorizada a partir de una imagen binaria rasterizada.



Fuente: Materials Science and Engineering; Realistic microstructural RVE-based simulations of stress-strain behavior of a dual-phase steel having high martensite volume fraction [10]

El estudio muestra que existe mayor soporte de esfuerzo por parte de la Martensita, y en contraste mayor deformación por parte de la ferrita, consecuentemente se predice que la localización en la falla del esfuerzo se producirá con una mayor probabilidad en los granos de la ferrita, de acuerdo a las observaciones fractográficas experimentales, argumentadas en el trabajo por medio de otras investigaciones realizadas previamente para el mismo Acero.

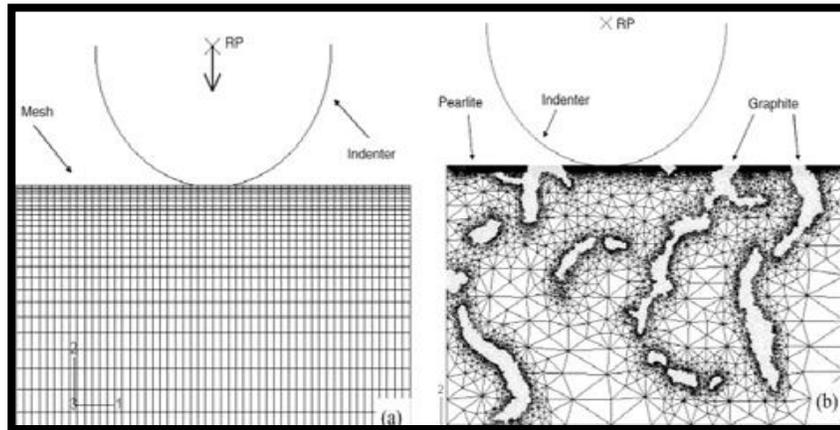
Otro de los autores que ha realizado estudios con herramientas computacionales es, Newton Fukumasu [11], utilizando para su estudio el software de elementos finitos Abaqus, con el fin de analizar el comportamiento y el desgaste del grafito de hierro compacto (CGI), cuando un indentador rígido de forma cilíndrica genera un campo de tensiones sobre la



superficie del sustrato representada con la microestructura característica del CGI, como se observa en la figura 2-3

Bajo esta misma idea, el autor busca importar esta microestructura dentro del software Abaqus al interior del material. Para ello, se apoya de otro paquete de simulación y creación de mallas, llamado OOF2, con el fin de crear los elementos del mallado a utilizar, basado en las morfologías que presentan sus microconstituyentes obtenidos por micrografía. Los parámetros principales que se tienen en cuenta para este estudio, corresponden a el diámetro del cilindro y la carga normal aplicada.

Figura 2-3: Abaqus, Modelo computacional en fundición gris



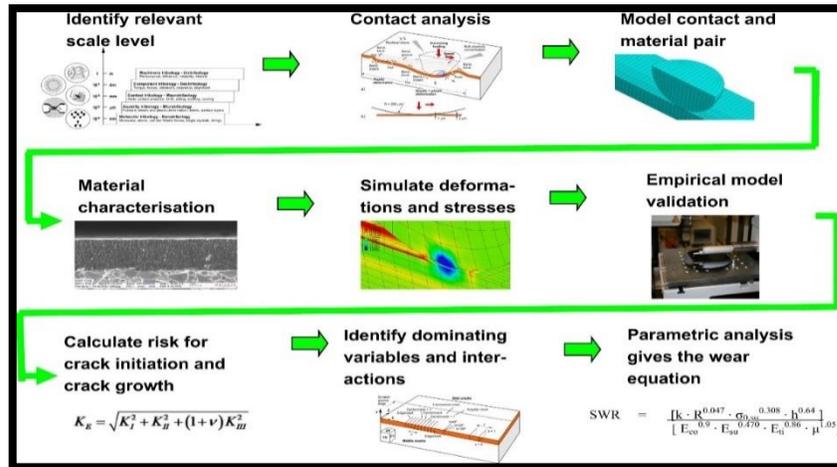
Fuente: Wear; Numerical analysis of the stresses developed during the sliding of a cylinder over compact graphite iron [11]

Los resultados obtenidos utilizando la simulación computacional, son comparados con los ensayos teóricos, previamente realizados en el laboratorio. Los resultados muestran una similitud entre los valores numéricos experimentales y los teóricos. Ambas magnitudes coinciden en la existencia de un contacto que genera cantidades significativas de deformación plástica en regiones periféricas, a causa del surco generado en la probeta. Adicionalmente, el método de elementos finitos muestra algunos parámetros complementarios, que no son de fácil adquisición durante la prueba de micro rayado experimental, cómo es el caso de los esfuerzos de la matriz de hierro fundido, dentro de las hojuelas de grafito.

En paralelo, otro de los autores que ha realizado investigaciones y ha contribuido con mayores resultados dentro de la rama de la tribología en las últimas décadas, tanto en ensayos de rayado con recubrimientos de forma experimental, como de modelamiento en herramientas computacionales, es Kennet Holmberg [12]. En su investigación, utiliza el método de elementos finitos para obtener como salidas de su modelo, magnitudes de esfuerzos y deformaciones manifestadas en un recubrimiento delgado de nitruro de titanio, empleando un acero de alta velocidad (ver figura 2-4).



Figura 2-4: Metodología y optimización de revestimientos computacionales



Fuente: Tribology international; Computational modelling-based wear resistance analysis of thick composite coatings [12]

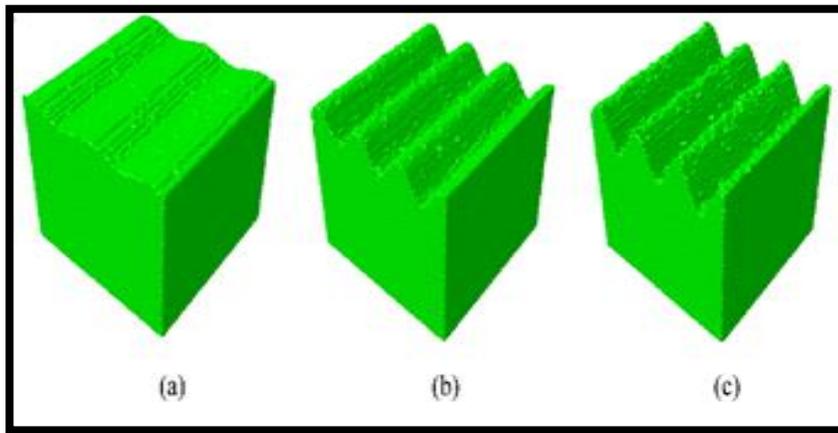
El modelamiento tiene lugar, mediante el uso del software ABAQUS; en donde se establecen como argumentos de entrada en el sistema para su modelamiento la creación de un indentador rígido, un acero de alta velocidad constituido con propiedades elasto-plásticas como sustrato, y la parametrización de los efectos manifestados a causa del endurecimiento por deformación.

El ensayo muestra dentro de su estudio, que las grietas se inician en la parte superior del recubrimiento debido a esfuerzos de flexión y tracción, en donde su crecimiento se propaga hacia la parte inferior de la superficie del sustrato (interface) a través del campo de tensiones residuales creado durante la indentación.

Estudios de la misma índole, son realizados por Anssi Laukkanen [13], en donde se evalúa el efecto de la rugosidad y la topografía superficial, en la creación de tensiones que afectan de forma directa el desgaste de un acero DLC (Diamante como carbono), estableciendo variaciones en las rugosidades y los ángulos de surcos topográficos, como se observa en la figura 2-5.



Figura 2-5: Topografía y modelos en materiales de (a) superficies lisas, (b) medias y (c) rugosas.



Fuente: Wear; Topographical orientation effects on surface stresses influencing on wear in sliding DLC contacts, Part 2: Modelling and simulations [13]

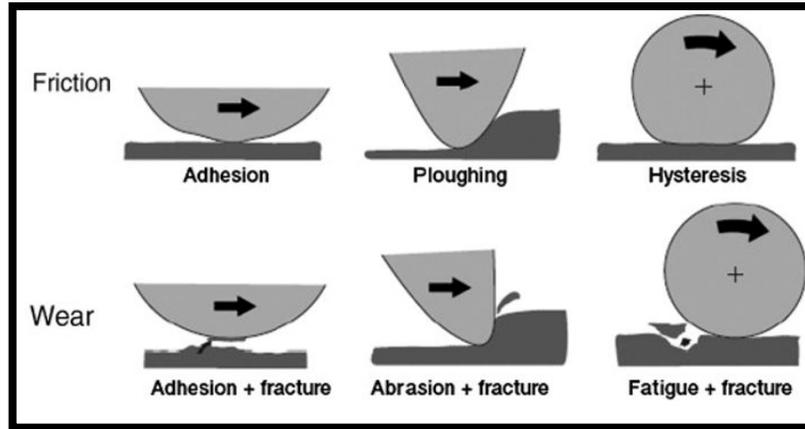
Estos parámetros nombrados en el párrafo anterior, se ingresan en el software de elementos finitos ABAQUS. La creación de los surcos topográficos, tiene lugar por medio de perfilometry (Kubity) 3D, un software desarrollado para perfilometría anisotrópica en sustratos que pueden carecer o presentar recubrimientos.

En las simulaciones se observan detalles en los efectos de las orientaciones topográficas principales, y en las tensiones locales que afectan el desgaste. Los cálculos por su parte muestran que la estructura de superficie, es aproximadamente cuatro veces más rígida en las direcciones de los surcos, comparada con el comportamiento flexible que presentan las direcciones perpendiculares. A su vez, en la macro topografía domina la tendencia al agrietamiento de la superficie y la deformación plástica, influyendo tanto en el desgaste como en la fricción, mientras que las características micro topográficas contribuyeron al agrietamiento.

En este mismo orden y dirección, Helena Ronkainen [14] Utiliza recubrimientos de distintos polímeros, justificando el cambio relevante de sus propiedades mecánicas, cuando se agregan capas delgadas sobre los sustratos, y afirmando la existencia e influencia significativa de la capa depositada a la hora de tener un control en los parámetros de fricción y desgaste (ver figura 2-6).



Figura 2-6: Mecanismos básicos de fricción y desgaste

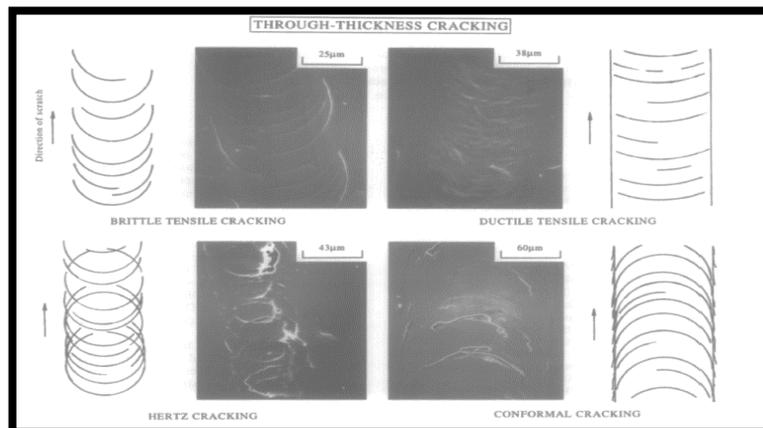


Fuente: Surface and Coatings Technology; Friction and wear of coated surfaces — scales, modelling and simulation of tribomechanisms [14]

El análisis del factor de intensidad en la tensión de crecimiento de la grieta, durante el contacto del indentador con respecto al recubrimiento, muestra la importancia tanto de considerar la carga, y la ubicación de la partícula, mientras que la biaxibilidad del esfuerzo tienen menor influencia en la propagación de grietas.

Por otro lado, Steve Bull [15] estudia los regímenes de carga, como se observa en la figura 2-7, en los cuales se presentan los principales modos de falla relacionados con mecanismos de adhesión, cuando el ensayo de rayado es realizado en una superficie recubierta, teniendo como partícula un indentador de carbono como diamante que presenta un aumento de carga, ya sea de forma continua o escalonada, en función del espesor del recubrimiento. En resumen, se produce el fallo por pandeo, el cual es un factor predominante en los modos de falla que tiene tendencia a ser duros, flexibles, y delgados en sustratos dúctiles. Por otro lado, la fragmentación de surcos se produce para recubrimientos más rígidos, debido a la cizalla compresiva que se propaga hasta la interfaz del sustrato.

Figura 2-7: Modos de falla, grieta propagada a través del espesor

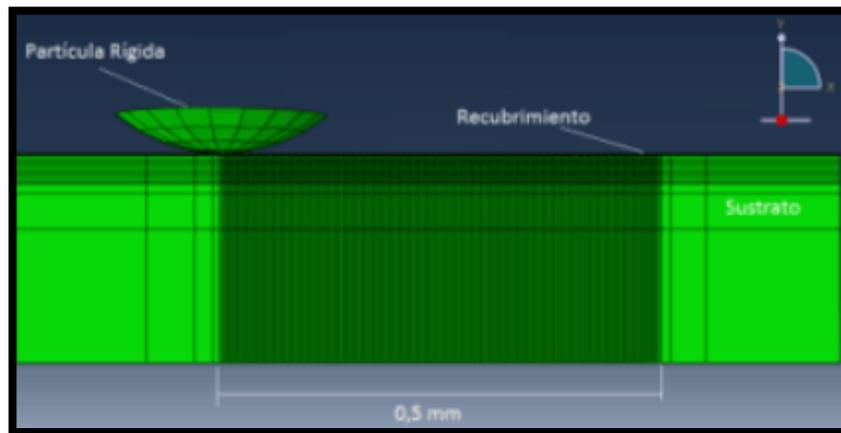


Fuente: Tribology International; Failure mode maps in the thin film scratch adhesion test [15]



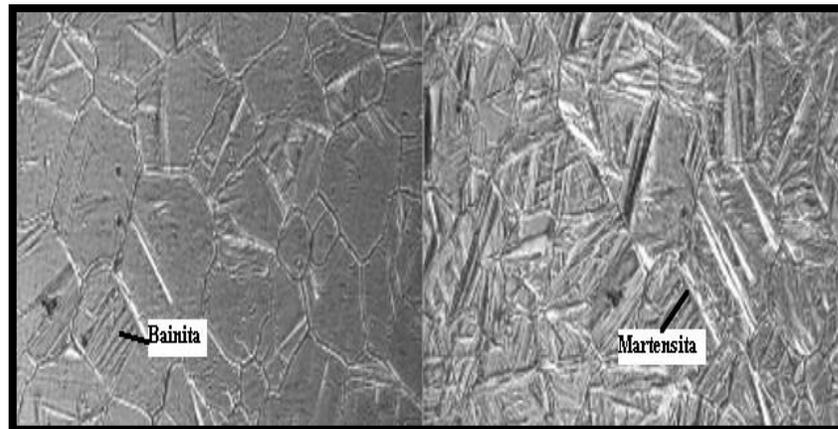
Un estudio adicional, direccionado sobre este mismo principio de desgaste utilizando el método de elementos finitos, es el realizado por Eduardo Pérez [16], en el cual se analiza la influencia de la rugosidad durante el ensayo de rayado mediante simulación computacional (Abaqus), con el esquema mostrado a continuación en la figura 2-9. Para llevar a cabo la creación del modelo se utiliza una partícula rígida como indentador con el fin de establecer el contacto entre los dos cuerpos (indentador -sustrato), conformado a su vez, por un recubrimiento que es sometido a cargas normales y cortantes. La investigación muestra la importancia de tener en cuenta la rugosidad, puesto que existe un aumento en la posibilidad de surgimiento prematuro de grietas durante el ensayo.

Figura 2-9: Abaqus Modelo de simulación sobre un sistema de recubrimiento



Fuente: Scielo; Simulación de esfuerzos S_{xx} durante repetidos ciclos de rayado sobre un sistema recubierto [17]

Por otro lado, las curvas transformación tiempo y temperatura, tienen un papel importante en las propiedades mecánicas y tribológicas finales obtenidas en los microconstituyentes de un material, por tal razón, Jingli Zhao [18] Estudia las microestructuras y propiedades mecánicas de los aceros multifásicos de Bainita / Martensita (B / M) tratados a altas temperaturas, mediante enfriamiento continuo, como se muestra en la figura 2-10 (fases resultantes). Los aceros son tratados a 623 K de temperatura con una velocidad crítica de enfriamiento de 0,5 K / . Sus resultados mostraron una microestructura multifase que contenía Bainita libre de carburo, Martensita y Austenita retenida. No obstante, la Bainita manifestada se observa libre de carburo por su proceso de nucleación y dispersada intergranularmente con una excelente resistencia a la tracción de 1920 MPa y un alargamiento total de 14.6%, siendo superior a la Martensita en el primer valor.

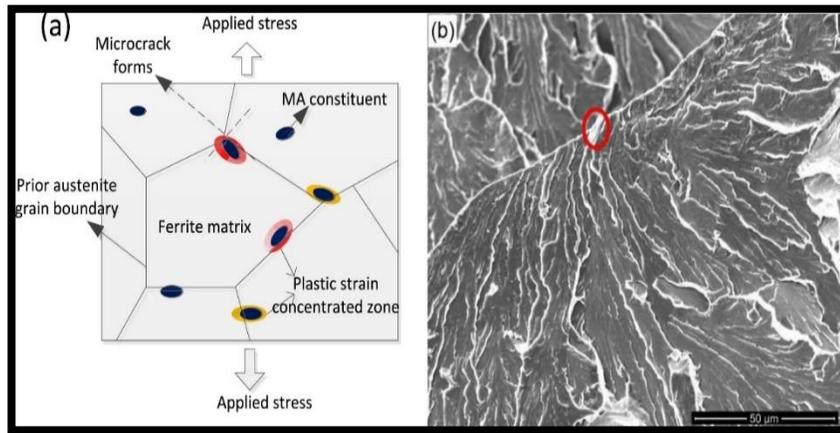
**Figura 2-10:** Formación de las microestructuras de Bainita y Martensita

Fuente: Materials Science and Engineering; Efecto de nucleación y morfología de carburo en estado libre en microestructura Bainítica con propiedades Bainita/Martensita en acero de multifase [18]

De igual manera, una vez se establecen los microconstituyentes por metalografía, se pueden realizar pruebas de nano indentación para determinar las propiedades mecánicas de manera cuantitativa de las fases presentes en el material. Uno de los autores que realizó este experimento es Liangyun Lan [19], el cual caracterizó el comportamiento mecánico de cada microconstituyente que se formó después de un recocido isotérmico en aceros de bajo contenido de carbono. Para ello, realiza pruebas de microscopía electrónica de transmisión, las cuales son llevada a cabo, en primera instancia, con el fin de obtener con mayor certeza los microconstituyentes intrínsecos presente en la microestructura del material (ver figura 2-11). Los resultados muestran que la dureza de la nano indentación medida de los microconstituyentes MA (Martensita-Austenita) disminuyó significativamente a temperatura constante, mientras que las láminas de ferrita tuvieron una dureza relativamente estable, durante la transformación de bainita. No obstante, las nano durezas de las láminas de ferrita muestran valores por debajo que la Bainita obtenida teóricamente en la literatura. Para la Bainita resultante a bajas temperaturas, los microconstituyentes de MA manifestaron, dos veces la dureza de la matriz ferrítica., observada por medio de la curva de carga-desplazamiento, y a su vez se reveló que sus microconstituyentes MA tienen una mayor tensión de corte dentro de la región plástica.



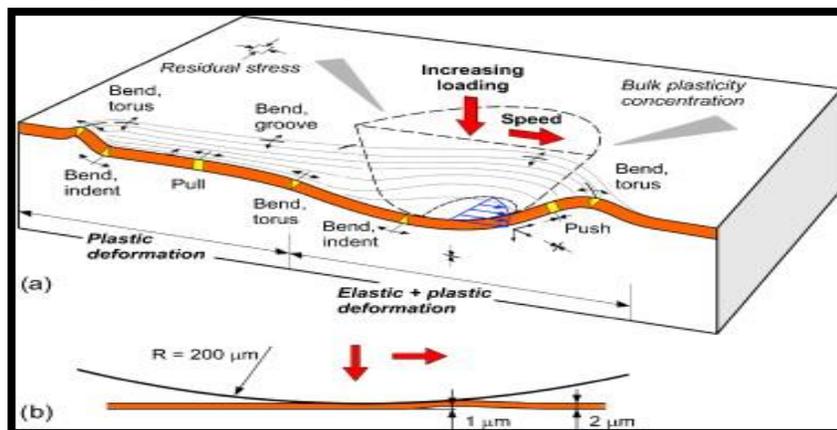
Figura 2-11: (a) Esquema de deformación plástica en microestructura Bainítica, (b) interface del contorno de la martensita y la austenita



Fuente: Materials Science and Engineering; propiedades mecánicas de la Bainita transformada isotérmicamente en acero de bajo carbono [19]

Por otra parte, el cálculo tridimensional en ensayos de rayado, ha permitido tener mejor exactitud en los modelamientos por método de elementos finitos, con respecto al mapeo de los esfuerzos a nivel de recubrimientos, ya que modela de forma más próxima los fenómenos reales presentes en un ensayo de rayado experimental, como lo son en su defecto el cálculo de fenómenos de pile up y sink in en sus planos de esfuerzos y deformaciones, por cargas combinadas. Bajo esta idea, Kim Wall [20] en su investigación desarrolla un modelo de simulación computacional tridimensional, por el método de elementos finitos en un ensayo de rayado, (ver figura 2-12), utilizando como recubrimientos, nitruro de titanio y carbono en forma de diamante, este último está conformado con propiedades similares a las del grafito y el diamante, y en ambos casos están constituidos de los mismos átomos de carbono (isomorfos).

Figura 2-12: Campo de tensión en superficie recubierta como resultado de cuatro cargas



Fuente: Wear; Análisis tribológico de los contactos recubiertos de nitruro de titanio (TiN y DLC) mediante modelado 3D FEM y simulación de tensiones [20]

Para las dos situaciones existentes, el estudio busca analizar la distribución de tensión principal en un ensayo de rayado, con un indentador de diamante esférico presentando



cargas variables a lo largo del recorrido, y sin exhibir tensiones residuales en la superficie. Los recubrimientos de Nitruro de titanio que poseen un módulo de Young más alto en comparación con el material del sustrato, demostraron altas tasas de tensiones residuales por tracción, mientras que el recubrimiento DLC, característico por presentar menor rigidez en comparación con el material del sustrato, no muestran tensiones residuales significativos por sus valores de esfuerzos, debido a que son relativamente bajos.

Finalmente, C. Mosquera [21], realiza un estudio acorde a la influencia del tamaño de grano en la microestructura de un acero 1020, considerando variación en el coeficiente de fricción, y la carga. La creación de los elementos finitos, es realizada en OOF2, y de allí es importada hacia Abaqus en un archivo. inp. El modelamiento en Abaqus se inicia con la creación de una partícula rígida, la cual tendrá las condiciones de indentador, y para el caso del sustrato se utiliza únicamente propiedades elásticas como características en el comportamiento de los microconstituyentes (Perlita y ferrita) como se observa en la figura 2-13.

Figura 2-13: Abaqus modelo de simulación Acero 1020



Fuente: Universidad de Ibagué; Influencia del tamaño de grano en los esfuerzos y deformaciones en un acero 1020 durante una carga progresiva [21]

Los resultados muestran dos hipótesis a modo de conclusión, en primera instancia se afirma que debido al mapa de esfuerzos entregado por Abaqus, se presenta una acumulación de material en el límite entre los contornos de los microconstituyentes, es decir que en este punto de la superficie se presentan los mayores esfuerzos. En segunda instancia se afirma que la perlita presenta cierto grado de rotación dentro de la matriz de ferrita, en un determinado espesor de penetración, lo que genera una mayor resistencia en el esfuerzo por parte de la matriz ferrítica.

Por último, es de resaltar que durante la etapa de la búsqueda bibliográfica, no se evidencian investigaciones relacionadas a el tema de estudio, que den respuesta a la pregunta matriz del proyecto “¿Utilizando la simulación computacional, es posible saber el papel que tiene el tamaño de grano y la microestructura del material del sustrato en el comportamiento de los esfuerzos superficiales y en la interface de un sistema recubierto durante el ensayo de rayado?, por tal razón, se tienen tres artículos bases como punto de partida para este estudio, los cuales son, en primera instancia la investigación realizada por Newton Fukumasu en una fundición gris utilizando el método de elementos finitos y softwares como Abaqus y OOF2. En segunda instancia se tiene un modelo computacional de tipo poligonal



en Abaqus de un acero de doble fase de medio carbono realizado por Jimming Zhou, en donde se compara la gráfica esfuerzo vs deformación de forma experimental, en función de la Martensita y Ferrita que conforman la microestructura de dicho Acero, y por último el trabajo realizado por Cristian Mosquera acerca de la influencia del tamaño de grano en la distribución de esfuerzo, llevado a cabo en la universidad de Ibagué.

Capítulo 3: Materiales y procedimientos

3.1 Metalografía y preparación de imagen

Inicialmente, se debe realizar el corte de una probeta de acero AISI 1045, con longitudes de 2 cm de largo por 1,27 cm (1/2in) de diámetro en una máquina de cizalla. A continuación, se lleva la probeta a un proceso de refrentado en torno, con el fin de garantizar homogeneidad de superficie en sus dos caras. Paralelamente, el acabado de dicha probeta deberá ser de tipo espejo al final del proceso de pulido, por lo que es necesario utilizar los distintos juegos de lijas (80, 220, 320, 400, 600, 1000), y oxido de aluminio con su respectivo paño, para su última etapa del proceso. Una vez obtenido el acabado requerido en la probeta, esta debe ser llevada al horno para la realización del proceso de temple, el cual es diseñado para alcanzar una temperatura de 870 °C, mantenerse durante 30 minutos y enfriar en aceite. Terminado el tiempo de la probeta en el horno después del calentamiento y en el respectivo medio de enfriamiento (**Aceite SAE 10W30**), se lleva a cabo el ensayo de metalografía, por medio de microscopía óptica. En este punto, la probeta es atacada en su sección transversal con nital al 2% y 98% de etanol [22], para posteriormente ser llevado a los lentes en el microscopio óptico, y de allí obtener las imágenes de los microconstituyentes presentes en el acero AISI 1045 templado, como se observa en la figura 3-1-1.

Figura 3-1-1: Procedimiento para obtener la metalografía



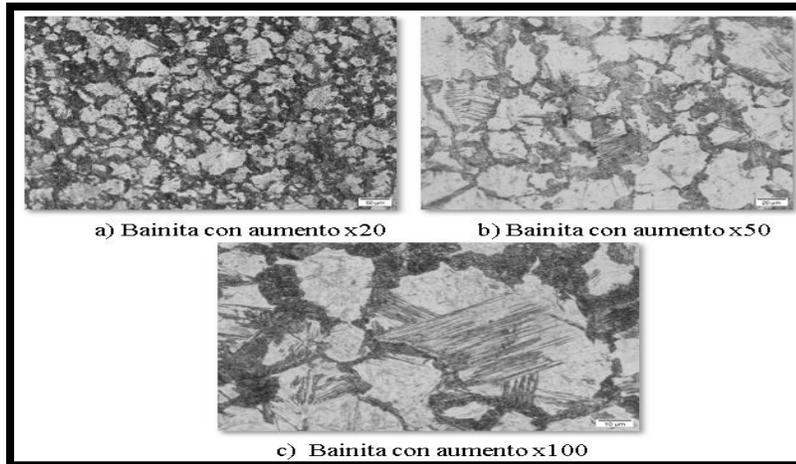
Fuente: Propia

La Bainita superior, se desarrolla en cristales paralelos de ferrita que crecen en los granos austeníticos enriquecidos de carbono por la expulsión del mismo, desde la formación de los cristales de ferrita durante el crecimiento del bloque, generando laminas gruesas oscuras de Cementita representativas en una combinación de ferrita y Cementita conocida como Bainita superior (ver figura 3-1-2). Sus propiedades mecánicas y su porcentaje de carbono, tiene un papel importante, ya que definen a partir del enfriamiento, el tipo de Bainita que se puede obtener al final del tratamiento térmico [23]. Este mecanismo de nucleación, simultáneamente presenta fenómenos de difusión, en donde aparece un microconstituyente complementario, conocido como matriz de martensita, con temperatura



mayor de transformación, en comparación a la obtenida de forma tradicional por la teoría con tasas de enfriamiento menos prolongadas, es decir velocidades críticas de enfriamiento más altas. [24]

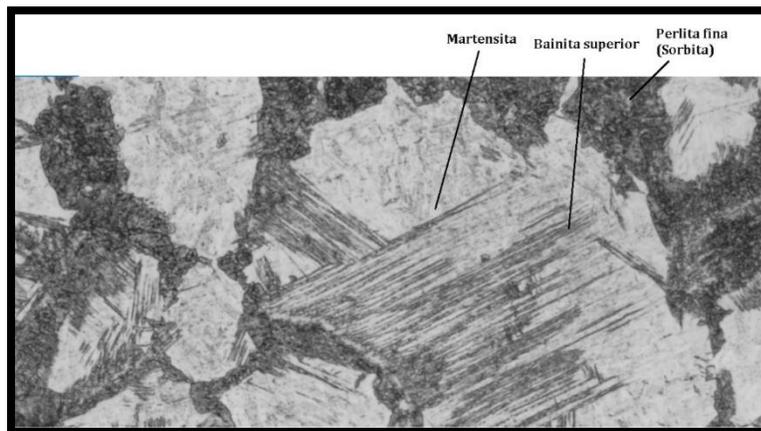
Figura 3-1-2: Metalografía Acero AISI 1045 templado en aceite



Fuente: Propia

Para el caso de estudio, como se indicó en el párrafo anterior, el color Blanco representa la matriz con microconstituyente de Martensita al interior de los contornos que hacen parte de las láminas finas de color gris a 60° grados en representación de Bainita superior y un último microconstituyente de Sorbita presente dentro de la Cementita con grano más grueso de color negro como se observa en la figura 3-1-3

Figura 3-1-3: Microconstituyentes presentes al interior de la microestructura



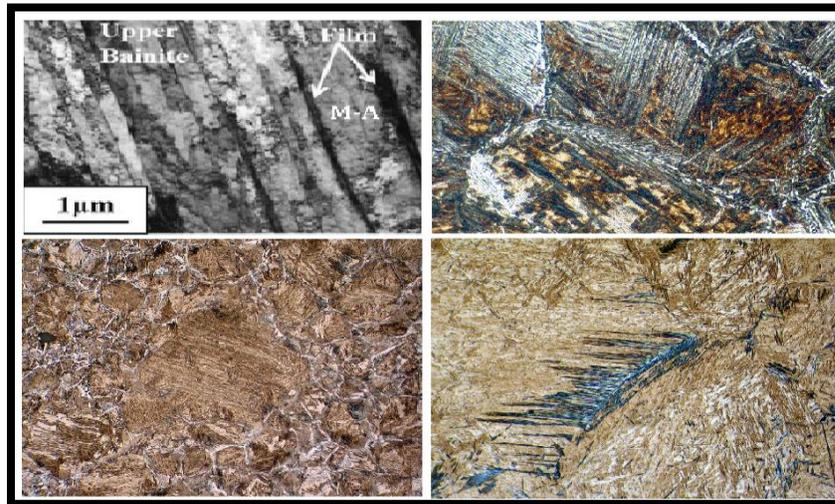
Fuente: Propia

Cabe resaltar, que para aceros aleados (caso particular), la transformación de Bainita, se presenta con otro microconstituyente adicional como es el caso de la austenita retenida (ver figura 3-1-4) en casi una misma fracción volumétrica que la martensita, debido a que ambas microestructuras actúan como fases estabilizadoras durante la partición de carbón



en el enfriamiento, lo que retrasa el proceso de difusión de la Martensita como consecuencia de su alto % de elementos aleantes presentes en el acero. [25]

Figura 3-1-4: Microconstituyentes presentes al interior de la microestructura de un acero aleado y un acero de medio carbono

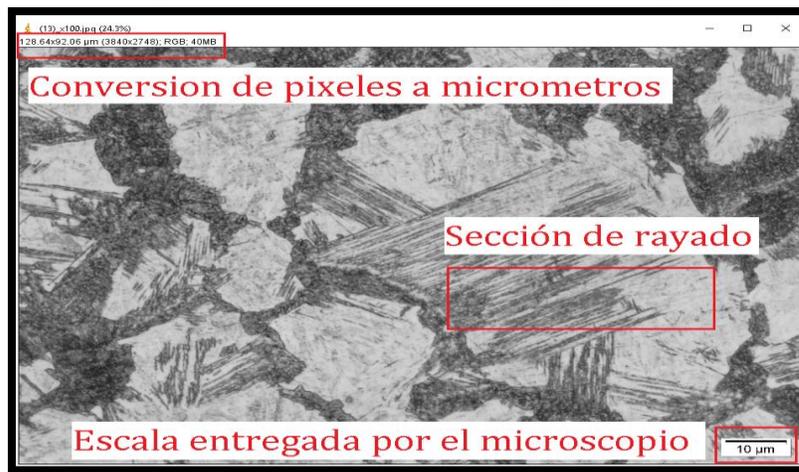


Fuente: Microstructures and high resistance in steels [26]

3.2 Tratamiento de imagen

El tratamiento de imagen requiere la conversión de píxeles (medida de una imagen) en función de unidades físicas reales, por esta razón es utilizado ImageJ [27], un software que permite a partir de la vectorización de la imagen y la medida entregada por el microscopio, lograr convertir la cantidad de píxeles pertenecientes a la imagen de micrografía en las unidades físicas requeridas (micrómetros), como se observa en la parte superior izquierda de la figura 3-2-1 encerrada en color rojo.

Figura 3-2-1: Calibración de imagen ImageJ

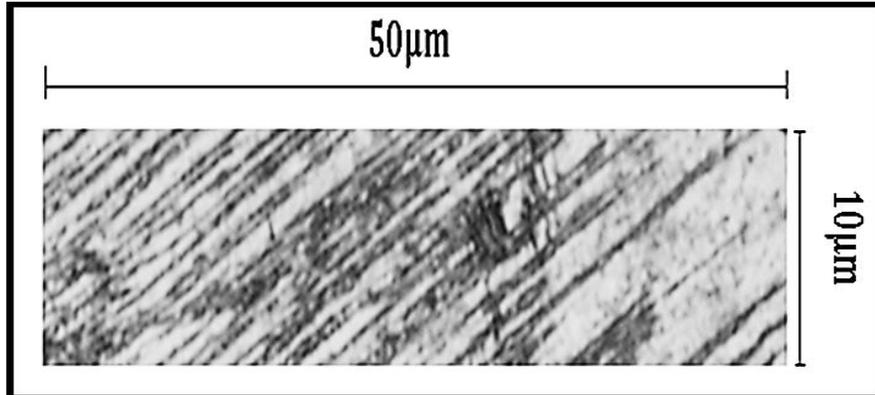


Fuente: Propia



El ensayo inicialmente se modeló en escala micrométrica, sin embargo, los patrones morfológicos de sus microconstituyentes presentes en la Bainita superior están conformados por regiones superficiales muy finas aglomeradas entre sí al interior del grano, como consecuencia su imagen o sección a estudiar se extrapola (sintetiza) en dicha superficie, como se observa en la figura 3-2-2. Por tanto, se establece en esta región, únicamente dos micro constituyentes como son la Martensita y la Bainita Superior.

Figura 3-2-2: Región de micrografía para el ensayo de nano rayado

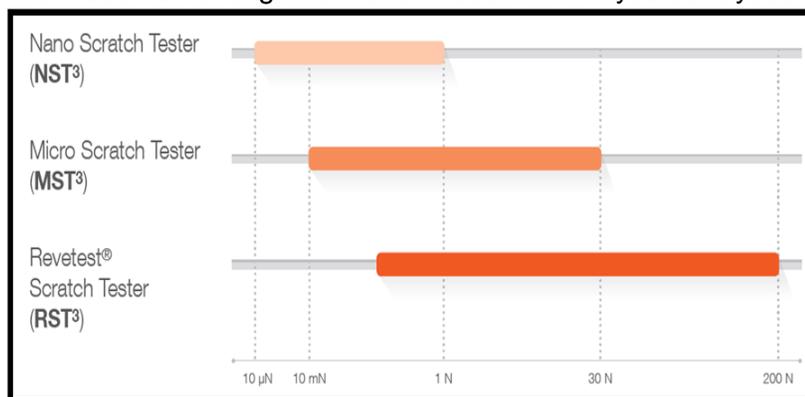


Fuente: Propia

Una vez acotada la región de la microestructura, se obtiene un sustrato con medidas de 50 μm de largo x 10 μm alto dentro de los rango que sugiere el manual de Anton Paar [28], regido por la norma ASTM D7187 [29], en lo correspondiente a las longitudes del rayado (10 μm -100 μm) y a la aplicación de las cargas normales (ver Figura 3-2-3).

Como se indicó en el párrafo anterior, la figura 3-2-3, muestra las cargas recomendadas para ensayos de rayado por la empresa Anton Para [28],

Figura 3-2-3: Escalas de carga normal utilizada en ensayos de rayado Anton Paar

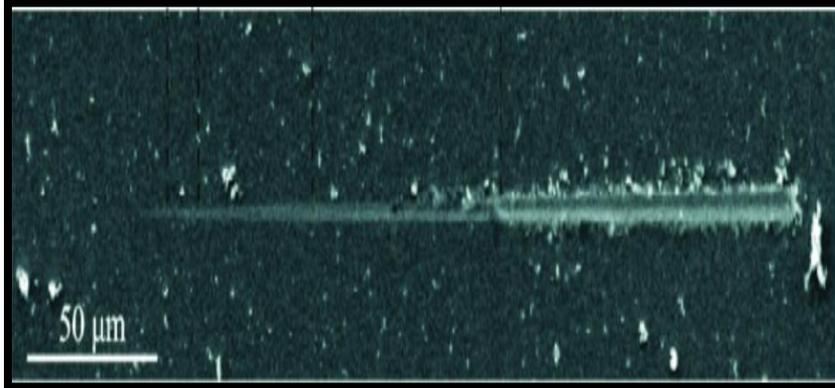


Fuente: Nano scratch test load scale Anton Paar [28]



Otro estudio utilizado como indicador para determinar la sección de rayado es el de Nikolau [30], en donde se evidencian los diferentes rangos de distancias para un ensayo de microrayado con valores con un rango entre ($20\mu\text{m}$ a $80\mu\text{m}$) como se observa en la figura 3-2-4, tanto para recubrimientos del tipo PECVD como para aleaciones ferrosas.

Figura 3-2-4: Longitud de recorrido recomendada en ensayos de nano rayado



Fuente: Nano scratch test in Systems and Microstructural Characteristics [30]

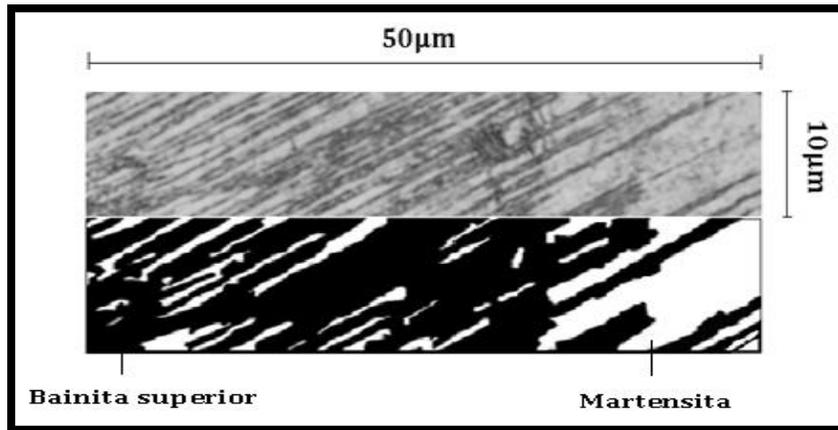
En este mismo orden de ideas, se procede aplicar una técnica llamada Stencial, que tiene como fundamento acotar patrones morfológicos en el caso presente mediante el cambio de tonalidad en escala de blancos y negros de las morfologías existentes, para ello se utiliza el software Photoshop CS6, el cual trae consigo en su interior una barra de tareas con la opción de desaturar, y la opción de umbral que muestra en una primera etapa la apariencia de la figura en blancos y negros

Para el caso de estudio se aplica primeramente el comando umbral con un valor de 170, de tal forma que se aproxime a la micrografía obtenida por tratamiento térmico, en cuanto a su forma de grano, sin perder en esencia las morfologías existentes de la microestructura de los microconstituyentes presentes en la parte superior del sustrato donde se realiza la indentación durante el paso de la partícula (indentador). A continuación, se aplica un filtro de tipo cuarteado con valores 8-5-3, que corresponde a el grosor de borde, a la cantidad de patrones morfológicos presentes, y a la saturación de blancos y negros manifestadas en los contornos con mayor biselaje, con el fin de facilitar la simplicidad de bordes en la creación de la malla.

De igual forma, para ciertas regiones en la parte superior de la micrografía se establece un único color, puesto que los filamentos dados por la matriz de Martensita y Bainita superior son tan finos que generan un alto costo computacional (Peso de simulación y tiempo de procesamiento) durante el rayado, lo que puede generar archivos de salida superiores a 300 GB por modelo simulado, para una imagen, como la observada en blancos y negros perteneciente a la figura 3-2-5.



Figura 3-2-5: Microestructura de blancos y negros calibrada



Fuente: Propia

3.3 Creación de mallado en OOF2

Cuando la imagen es acotada con valores de unos y ceros (blancos y negros), se exporta con medidas físicas de $50 \mu\text{m} \times 10 \mu\text{m}$ de Photoshop CS6 a el software OOF2, donde a partir de los módulos de MICROSTRUCTURE, GRAPHICS, Y SKELETON, se crean dos grupos de pixeles, cada uno con los nombres respectivos de los microconstituyentes y se asignan estos grupos a las superficies definidas para cada microestructura según su morfología (ver figura 3-3-1).

Figura 3-3-1: Asignación de pixeles en microconstituyentes OOF2



Fuente: Propia

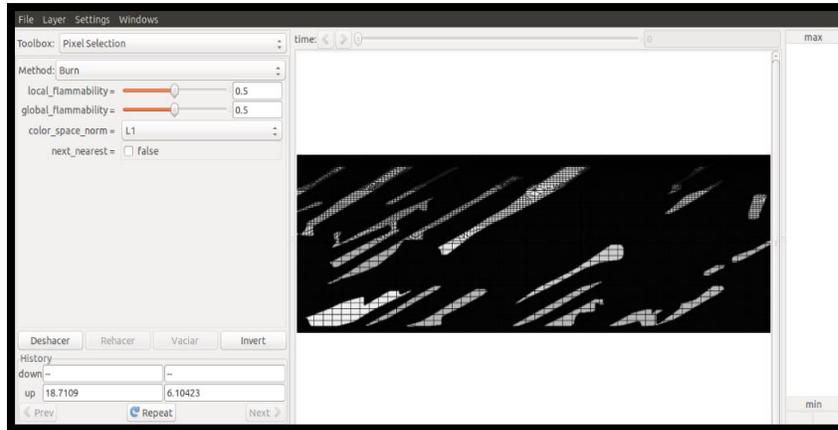
La creación de la malla se lleva a cabo de forma manual, ya que el software, permite realizar un rastreo de la imagen y asignar elementos de diferentes geometrías en los contornos fronterizos de los granos, y al interior de la superficie de los microconstituyentes.

Para ello, se utilizan algunos comandos en la interfaz de OOF2 como refinamiento de elementos heterogéneos, racionalización, suavización de elementos en los contornos de



los grano y arreglos de elementos a partir de un criterio que utiliza el software llamado “Energy average”, [31] en esencia lo que se busca es aplicar un promedio en la migración de nodos que son movidos en los alrededores dentro de los contornos de grano (ver figura 3-3-2). Para indagar a más detalle acerca de la creación de mallas, se recomienda revisar el video “creación de malla tutorial OOF2” al interior del anexo C, al igual que los pasos realizados para la creación del mallado.

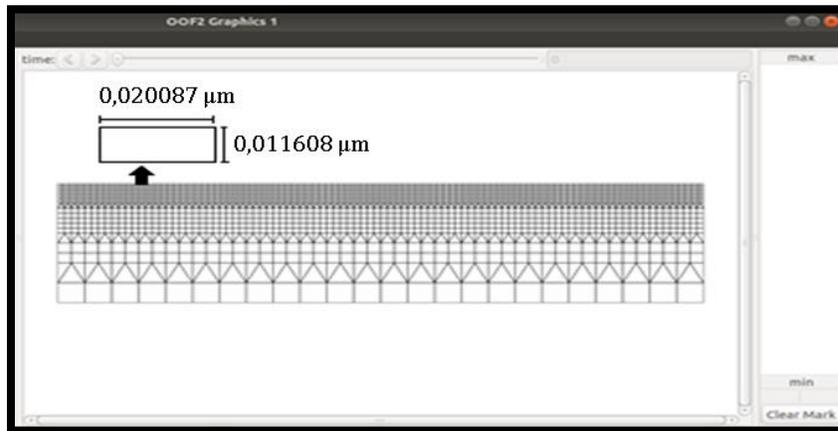
Figura 3-3-2: Creación de mallado OOF2



Fuente: Propia

Los refinamientos o capas de mallado se realizan de forma decreciente desde la parte inferior hasta la superior del sustrato (ver figura 3-3-3), puesto que la región crítica en la distribución de esfuerzos, no supera por indentación una profundidad superior a los $1 \mu\text{m}$, dicho valor es corroborado en las pruebas experimentales realizadas en este estudio con mallados automáticos en la fase de experimentación con diferentes modelos, estableciéndose de esta forma, una capa a nivel superficial con mejor refinamiento y disminuyendo costo computacional en regiones inferiores al área de contacto.

Figura 3-3-3: Mallado por capas OOF2

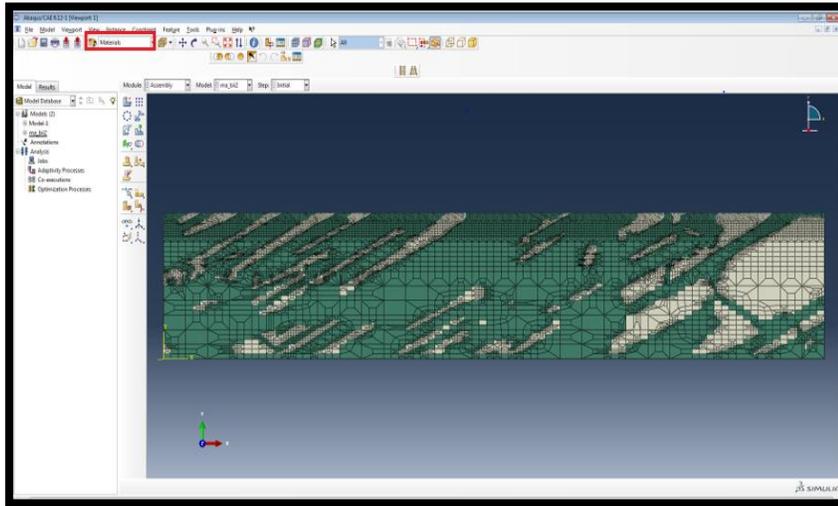


Fuente: Propia



Posteriormente, se procede a importar la malla creada hacia Abaqus, en un archivo con terminación “.inp”, que permite importar la malla al interior del sustrato de forma automática, como se evidencia en la figura 3-3-4, compuesta por unos módulos que tienen lugar en el modelamiento del nano rayado, a partir de unos valores de entrada requeridos por el sistema, para su simulación, dentro de la interfaz de ABAQUS

Figura 3-3-4: Malla importada desde OOF2 en ABAQUS



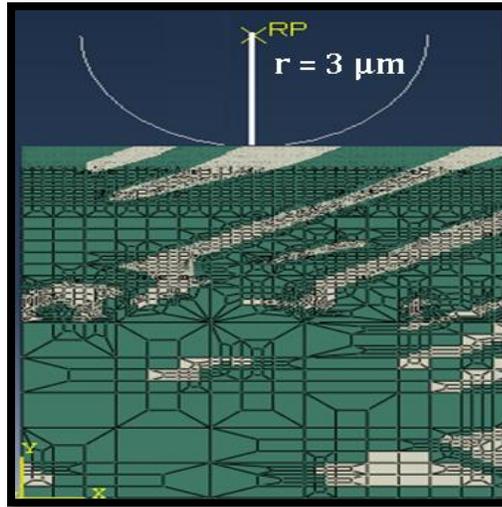
Fuente: Propia

3.4 Creación del modelo en Abaqus

La creación del modelo en Abaqus da inicio con el módulo de partes.

3.4.1 Modulo de partes

En este módulo se crea el sustrato, luego de la importación del modelo, se despliega una ventana, en donde, mediante el comando “RENAME” se renombra la parte creada con el nombre de “*sustrato*” proveniente de OOF2. A continuación, se crea el indentador con el comando “CREATE”, y se modela de tal forma, que este corresponda a una partícula rígida bidimensional con un ángulo de apertura de 60° grados, $3 \mu\text{m}$ de radio, y superficie de contacto semicircular, como se observa en la figura 3-4-1-1 al interior de la interfaz de Abaqus, en paralelo a los estándares de la norma ASTM D 7187-15 [29].

**Figura 3-4-1-1:** Abaqus, indentador con radio de 3 μm 

Fuente: Propia

Otra investigación tomada como referencia para la creación del indentador es el trabajo realizado por Michael Hicks, mostrado a continuación en la figura 3-4-1-2 [33], el cual está dirigido a la caracterización de sustratos para distintas escalas de rayado. En dicho estudio, existen dos tipos de indentadores, correspondientes a geometrías esféricas y a geometrías cónicas, en donde estas últimas, terminan teniendo como región de contacto una semicircunferencia que se manifiesta bajo dos tipos de aperturas, correspondientes a ángulos entre 60° y 90° , establecidos por la norma ASTM D7187 [29] Por estas razones, el indentador de $3 \mu\text{m}$ de radio que se modela en esta investigación y el de $1,7 \mu\text{m}$ de radio representan en los ensayos experimentales lo que se conocen como indentadores cónicos con variación en su ángulo de apertura.

El motivo por el cual se varía sus ángulos de apertura, y sus radios, corresponden a identificar en cuál de las dos partículas (indentadores) se concentran los esfuerzos de forma más significativa con respecto al material del sustrato que contiene Bainita Superior.



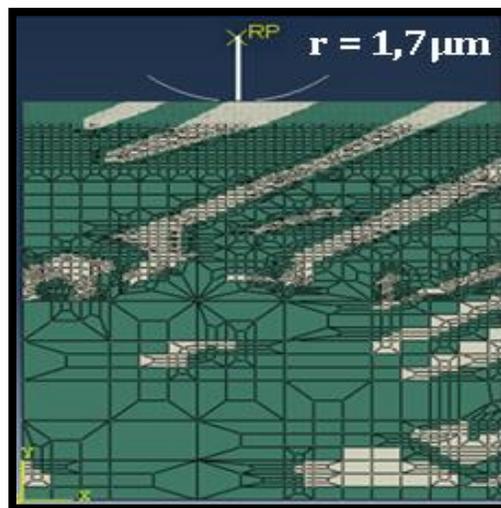
Figura 3-4-1-2: Comparación de las condiciones de prueba de rayado instrumentada, en escalas crecientes

	Nano-Scratch Test	Micro-Scratch Test	Macro-scratch Test
Indent type	60 ° spherico-conical	90 ° spherico-conical	100 ° spherico-conical
Indenter radius	3 μm	10 μm	200 μm
Initial load	20 mN	25 mN	0.5 N
Final load	1 N	5 N	30 N
Scratch length	50 μm	100 μm	5 mm

Fuente: Fundamentals and characterizations of scratches [32]

Bajo esta misma idea, se crea un segundo modelo de indentador, dentro de cual no se presenta cambio en su geometría, sin embargo, su ángulo de apertura es de 90° grados y su radio a 1,7 μm (ver figura 3-4-1-3), seleccionado aleatoriamente para mostrar el efecto del tamaño del indentador en la distribución de esfuerzos, deformaciones, y finalmente compararse con el primer modelo de indentador construido anteriormente de 3 μm.

Figura 3-4-1-3: Abaqus, indentador con radio de 1,7 μm



Fuente: Propia

Lo anterior, concerniente a la creación del segundo modelo con la misma geometría, se establece, debido a la manifestación de errores en indentadores con terminación geométrica distinta a los semicirculares, como es el caso de los indentadores cónicos con terminación en punta. Durante la simulación en ABAQUS, se observa que como consecuencia del contacto entre los dos cuerpos (indentador sustrato), si el indentador presenta un único punto de sujeción o anclaje (terminación cónica triangular), contrario a

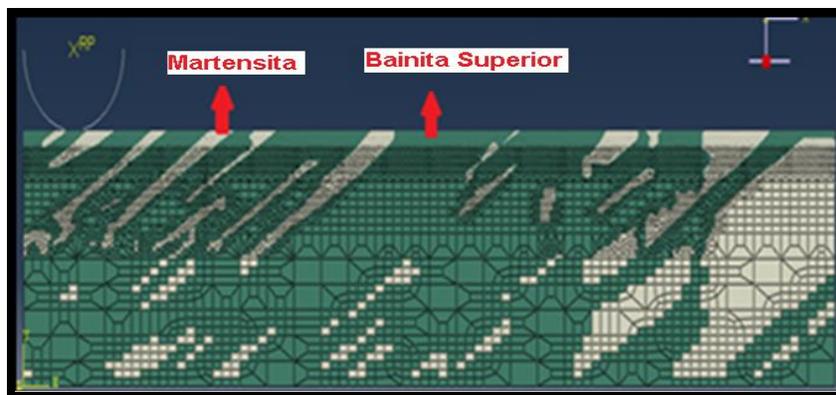


un conjunto de puntos que forman la superficie, como es el caso de la punta con terminación semicircular, se manifiestan atascamientos por parte del indentador cónico a lo largo del ensayo, como consecuencia de saltos del mismo sobre los nodos, provocando esfuerzos despreciables en el sustrato, sin un anclaje continuó en el rayado, entre nodo e indentador y una manifestación en el mapeo de esfuerzos no homogénea, comprobado con la simulación de algunos modelos realizados de forma experimental, y a su vez argumentado bajo la sección del libro “Prueba de penetración de cono 2018: Actas de la 4ta Internacional” en su página 484 para modelos de simulación en ABAQUS [33].

3.4.2 Modulo de propiedades mecánicas

Una vez creado el indentador, se avanza al módulo de propiedades mecánicas “MECHANICAL PROPERTIES” del modelo, en donde el sistema solicita ingresar dos valores de la región elástica y de la misma forma, otros dos de la región plástica, en los microconstituyentes presentes al interior de la microestructura representada en la interfaz de ABAQUS, con color verde y blanco (ver figura 3-4-2-1).

Figura 3-4-2-1: Abaqus, microconstituyente en el sustrato



Fuente: Propia

Para la obtención de estos valores requeridos por ABAQUS, se recopila información en una investigación previa a este estudio, realizada por Caballero, y Bhadeshia [35], en donde se ha determinado por medio de micro indentación las propiedades mecánicas de los microconstituyente de Bainita superior y Martensita, en un acero Bainítico (Fe-0.4C-2Si-4Ni), como se ilustra en la tabla 3-4-2-1. Este acero Bainítico, al contener un porcentaje de silicio mayor al 1%, hace que el contenido de carbono en la Bainita sea similar a las propiedades mecánica correspondientes del acero AISI 1045 de medio carbono, ya que el silicio tiene como consecuencia en los aceros disminuir las propiedades mecánicas (Ablandamiento) del material, como lo afirma el libro tratamiento térmico de los aceros de Apraiz Barreiro [1].



Tabla 3-4-2-1: Propiedades mecánicas de la Bainita superior y Martensita en la región elástica

Bainita Superior	Propiedades Mecánicas	Valor (GPa)	Martensita	Propiedades Mecánicas	Valor (GPa)
Propiedades Elástica	Módulo de Young	210	Propiedades Elástica	Módulo de Young	210
	Módulo de Poisson	0,33		Módulo de Poisson	0,29
Propiedades Plástica	Esfuerzo de fluencia	1,2	Propiedades Plásticas	Esfuerzo de fluencia	1,15
	Deformación Plástica	0		Deformación Plástica	0

Fuente: Materials Science and Technology; Design of novel high-strength bainitic steels part 1 [34]

No obstante, el módulo de propiedades mecánicas en ABAQUS se retroalimenta, con valores pertenecientes a la región elástica y plástica. Para esta última, se debe ingresar por lo menos 10 valores de esfuerzos presentes sobre dicha región en función de cada micro constituyente, desde el esfuerzo de fluencia hasta el esfuerzo de ruptura. El cálculo de estos puntos se lleva a cabo mediante Matlab.

3.4.2.1 Microestructura de Bainita Superior

Inicialmente, se despeja la deformación unitaria sobre el límite de fluencia y se calcula con los valores de la tabla 3-4-2-1, dentro de la región elástica descrita por la ecuación 1 (Ley de Hooke), tomada del libro de Ciencia e ingeniería de Materiales en la sección del capítulo 6 “propiedades mecánicas de los metales”. [35]

$$\sigma_y = E\varepsilon \quad \text{Ecuación (1)}$$

Donde :

σ_y : Esfuerzo de fluencia (MPa)

E : Modulo de elasticidad (MPa)

ε : Deformación unitaria (mm/mm)

$$\varepsilon = \frac{1200 \text{ Mpa}}{210000 \text{ Mpa}}$$

$$\varepsilon = 0,0057 \frac{\text{mm}}{\text{mm}}$$

A continuación, se toma un dato complementario del estudio “diseño de nuevos aceros Bainíticos de alta resistencia”, citado en la parte inferior de la tabla 3-4-2-1, referente a el valor de “n” tanto para el microconstituyente de Martensita, como para la Bainita superior, utilizados en la ecuación 2 (Ley de Hollomon), encargada de describir el comportamiento mecanico del material sobre la region plastica y obtenida de la misma forma que la ecuacion citada anteriormente.



$$\sigma_y = k\varepsilon^n \quad \text{Ecuacion (2)}$$

Donde :

σ_y : Esfuerzo de fluencia (MPa)

n : Coeficiente de endurecimiento por deformación

K : Coeficiente de resistencia (Mpa)

ε : Deformación unitaria (mm/mm)

De la ecuacion (2), se despeja el coeficiente de resistencia de la Bainita superior en la zona plastica

$$K = \frac{1200 \text{ Mpa}}{(0,0057)^{0,025}}$$

$$K = 1365,477 \text{ Mpa}$$

Despues de hallar el valor de K , se crea un vector en Matlab que recorre desde el limite de fluencia (punto limitante entre la region elastica y plastica) hasta el esfuerzo maximo de ruptura, con un rango de pasos de 0,001 hasta 0,04, correspondientes a valores de deformacion unitaria para el microconstituyente de Bainita superior, calculado por medio de la ecuacion (2).

El valor de 0,04 condicionado como punto final de recorrido en el eje de la abcisa, se obtiene de dos estudios, en donde se realizan aproximaciones al grafico esfuerzo deformacion para las microestructuras de Bainita superior y Martensita, [36] [34]

Los resultados de los calculos llevados a cabo por Matlab, acerca de las magnitudes de esfuerzos para la Bainita superior, son los mostrados en la tabla 3-4-2-1-1. Direccionados a la retroalimentacion del sistema al interior de ABAQUS, en el modulo de propiedades mecanicas.



Tabla 3-4-2-1-1: Valores esfuerzo vs deformación en la región plástica de la Bainita superior

Bainita superior	
Deformación unitaria (mm/mm)	Esfuerzo (MPa)
0,0057	1199,5195
0,0077	1258,6525
0,0107	1326,6878
0,0127	1363,5653
0,0177	1437,9476
0,0207	1474,4247
0,0227	1496,3441
0,0257	1526,3588
0,0307	1570,3971
0,0398	1601,4746

Fuente: Propia

3.4.2.2 Microestructura de Martensita

De igual forma que para la Bainita superior, se procede a realizar el cálculo para los valores de la Martensita, empleando las magnitudes de la tabla 3-4-2-2, como se evidencia a continuación en el cálculo de la deformación unitaria

$$\varepsilon = \frac{1150 \text{ Mpa}}{210000 \text{ Mpa}}$$

$$\varepsilon = 0,0058 \frac{\text{mm}}{\text{mm}}$$

Posteriormente, se obtiene a partir de la misma investigación citada en la sección anterior de la Bainita, el valor del Coeficiente de endurecimiento por deformación "n"

$$K = \frac{1150 \text{ Mpa}}{(0,0058)^{0,020}}$$

$$K = 1274,762 \text{ Mpa}$$

Finalmente, el valor limitante del vector creado en Matlab como deformación unitaria, para el cálculo de los esfuerzos en la región plástica de la Martensita, tiene una magnitud de 0,035 en el eje de la abscisa, y se obtiene de la misma investigación citada en la sección anterior, para la Bainita superior.



De igual manera, luego de realizar los calculos por Matlab de los esfuerzos para la Martensita, se obtienen los valores mostrados en la tabla 3-4-2-2-1, los cuales se utilizan para la retroalimentacion del sistema al interior de ABAQUS, en el modulo de propiedades mecanicas

Tabla 3-4-2-2-1: Valores esfuerzo vs deformación en la región plástica de la Martensita

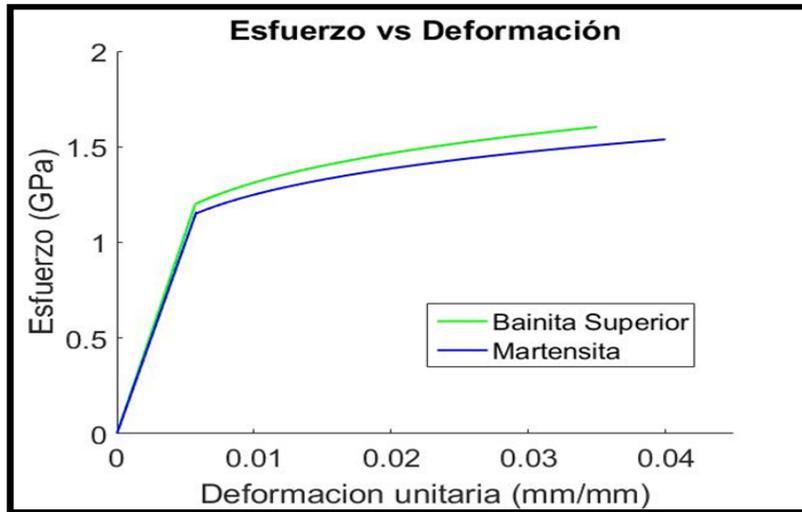
Martensita	
Deformación unitaria (mm/mm)	Esfuerzo (MPa)
0,0058	1151,4945
0,0088	1225,8012
0,0118	1280,9435
0,0148	1325,2167
0,0178	1362,4189
0,0208	1394,6241
0,0238	1423,096
0,0268	1448,6647
0,0298	1471,9061
0,0348	1506,5535

Fuente: Propia

A continuación, se procede a graficar los valores de las tablas 3-4-2-1, 3-4-2-1-1,3-4-2-2 y 3-4-2-2-1 por medio de Matlab, relacionadas a esfuerzos y deformaciones unitarias en las regiones elastoplásticas, como se observa en la figura 3-4-2-2-1. Es de resaltar, que los valores obtenidos en las tablas anteriores, son convertidos a GPa para el ingreso en ABAQUS, y la creación de su código se observa con mayor detalle en el anexo A.



Figura 3-4-2-2-1: Matlab, Curva esfuerzo deformación real para Bainita superior y Martensita

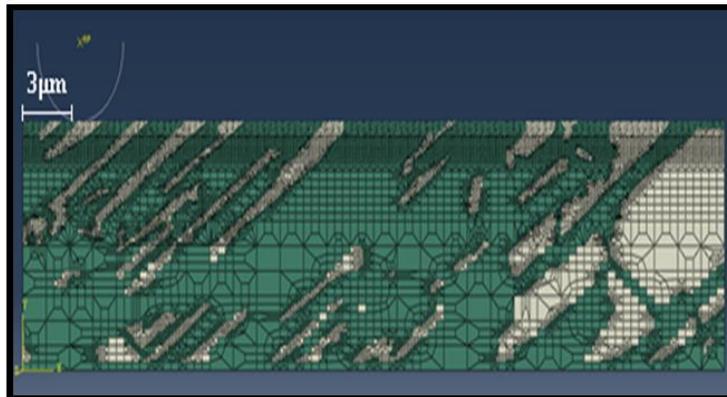


Fuente: Propia

3.4.3 Modulo de ensamblaje

El contacto entre los dos cuerpos (indentador y sustrato), se lleva a cabo por medio del módulo de ensamblaje "ASSEMBLY", mediante la interconexión de la partícula creada como indentador, en un nodo perteneciente a el sistema de mallado del sustrato, estableciéndose una coordenada en los modelos de simulación de nano rayado con componente en X de $3\ \mu\text{m}$ y en Y de $10\ \mu\text{m}$ (ver figura 3-4-3-1). Esta coordenada, indica la localización del punto inicial de contacto entre el indentador y el sustrato seleccionada por protocolo de la norma ASTM E18 - 03 [37], dentro de lo sugerido por el manual de Anton Paar, estableciendo un espacio mínimo entre 2,5 a 3 veces el diámetro de contacto del indentador, desde el inicio del sustrato (lateral), hasta el primer punto de sujeción.

Figura 3-4-3-1: Abaqus, ensamble entre indentador y sustrato



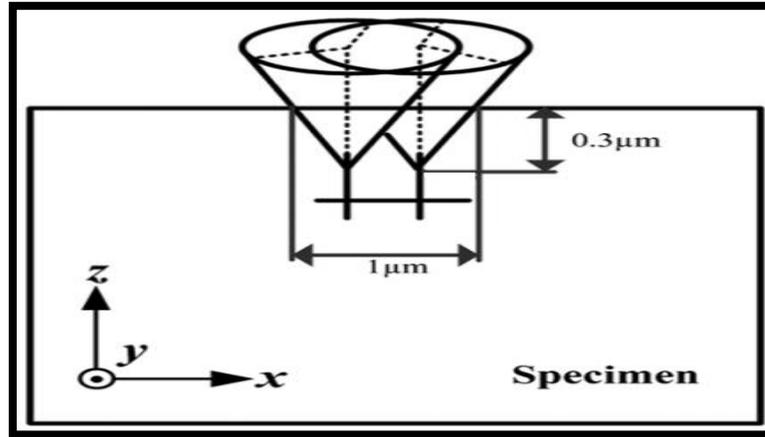
Fuente: Propia

Al igual que en la norma ASTM E18, otro estudio alternativo que trata acerca de la influencia del ángulo inclinado de doble punta en el proceso de micro rayado, por método



hidrodinámico, Muestra la localización del indentador a una distancia de 3 veces la magnitud del diámetro de contacto, como se observa en la figura 3-4-3-2.

Figura 3-4-3-2: Esquema de doble punta con terminación semicircular



Fuente: A study on the effect of double-tip inclined angle on micro-scratching process using smooth particle hydrodynamic method [38]

3.4.4 Modulo de Pasos

El movimiento del indentador en el sistema de mallado, se realiza mediante la acción de pasos “STEPS”, y se define como el tiempo de aplicación de la carga normal por parte del indentador sobre un elemento geométrico perteneciente al mallado. Para la investigación se toma como referencia, las recomendaciones de valores en un ensayo de nano scratch test recopilada en el instituto tecnológico de Madras India, acerca del uso en las Herramientas de simulación para ensayos de nano rayado [39] .

El modelamiento del sistema consta de tres pasos; un paso inicial predeterminado entregado por ABAQUS, un paso de rayado y un paso final. Estos últimos dos pasos, presentan los mismos valores en sus parámetros, y asignan una función no lineal (Nlgeom on) al cálculo del modelo, lo que permite tener un comportamiento más próximo de las magnitudes físicas requeridas, para el caso de los esfuerzos y las deformaciones (Argumentos de salida). Las magnitudes ingresadas en los dos pasos finales al interior de la interfaz de ABAQUS corresponden a los valores de la tabla 3-4-4-1.

Tabla 3-4-4-1: Abaqus, Modulo de pasos

Step	Number
Nlgeom	on
Number of increments	1000000
Initial	0,01
Minimum	1,00E-15
Maximum	1

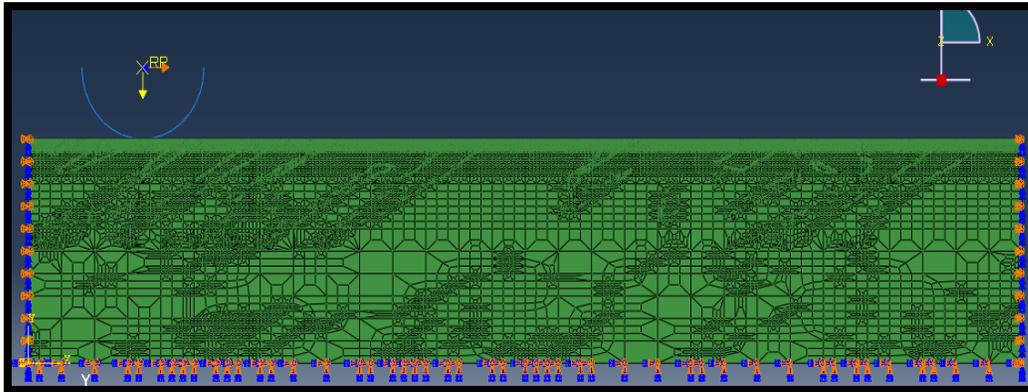
Fuente: Propia



3.4.5 Modulo condiciones de equilibrio y fuerzas

Las condiciones de equilibrio del sustrato son creadas dentro del módulo de interacciones “INTERACTIONS”, se establece una relación de tipo “ENCASTRE” (Empotramiento) en la parte inferior del sustrato, y de restricción de movimiento en U1(eje x), U3(eje z), U2 (eje y) “YASYM” en los laterales (ver figura 3-4-5-1)

Figura 3-4-5-1: Abaqus, Condiciones de equilibrio



Fuente: Propia

La magnitud de la carga normal ejercida por parte del indentador, se establece en el punto de referencia (RP) creado en el módulo “PART” del centroide de la semicircunferencia. Las cargas de los ensayos de nano rayado corresponden a valores de: 0,5N, 0,3 N, y 0,8N respectivamente y sus magnitudes son tomadas con arbitrariedad dentro del rango de valores recomendados por el manual de Anton Paar, citado anteriormente en la figura 3-2-3 de la sección 3.2 correspondiente al tratamiento de imagen.

Los coeficientes de fricción ingresados en la interfaz de ABAQUS en la retroalimentación del sistema, están conformado por valores de 0,0,1,0,2 y 0,4, obtenidos de tres estudios citados a continuación, en donde se evidencia para el primer caso, coeficientes de fricción en un rango de (0-0,4) para diferentes microestructuras obtenidas por tratamientos térmicos de un acero 1045 entre estas una de Bainita, partiendo de la influencia del medio de enfriamiento sobre la perdida de material, y a su vez la influencia de la dureza presente en cada microestructura para realizar el cálculo del coeficiente de fricción, llevado a cabo en la universidad de Ibagué, utilizando el banco pin on disk [40]. Para el segundo caso, se hallan valores del coeficiente de fricción entre un cerámico (indentador) y un acero reforzado (sustrato) utilizando lubricantes. Los resultados recomiendan trabajar en un rango de (0-0,2) en lo que corresponde a valores calculados para el coeficiente de fricción [41] .El último caso de investigación parametriza una tabla con diferentes coeficientes de fricción en función de los materiales en contacto [42]

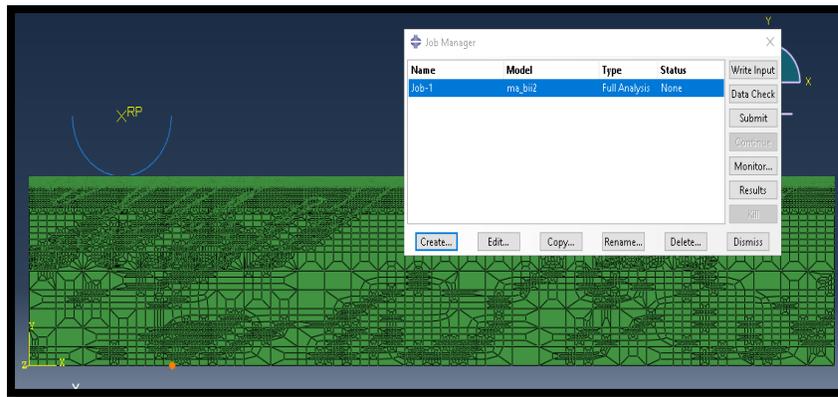
Por otro parte, se establece una distancia en la longitud de rayado de 40 μm que se encuentra dentro de los rangos de ensayos de nano rayado citados por protocolo en la sección 3.2, de la figura 3-2-3, con magnitudes que oscilan entre (20 μm - 80 μm) para algunos ensayos de rayado en aleaciones ferrosas.



3.4.6 Modulo de trabajo

Finalmente, se salta al último módulo correspondiente a trabajo “JOB” en este módulo se ejecuta, se registra y se guarda por medio de “SUBMIT” un archivo de salida.odb concerniente a la simulación, con el mapeo de esfuerzos y deformaciones entregadas por el modelo. La interfaz en ABAQUS del módulo de trabajo se observa en la figura 3-4-6-1, para estudiar a más detalle el modelamiento en Abaqus se recomienda dirigirse a la carpeta anexos, en la cual se encuentra un tutorial (“creación de modelo en Abaqus”) o en su defecto al interior del anexo D de este documento, con la explicación de cada uno de los módulos presentes en dicho software para el acondicionamiento del ensayo

Figura 3-4-6-1: Abaqus, Creación de archivo. odb y ejecución de simulación



Fuente: Propia

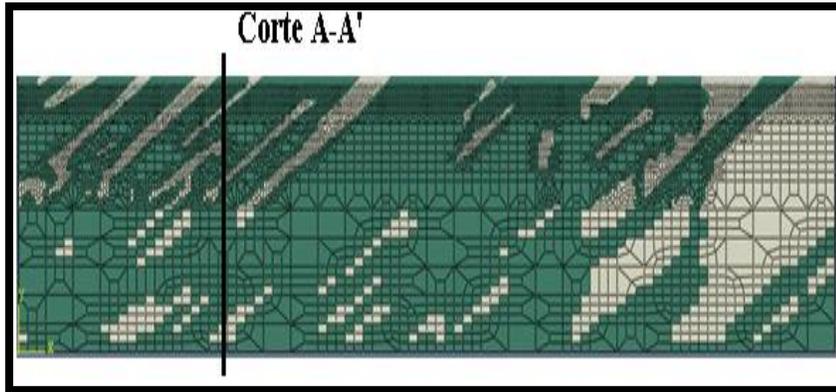
3.5 Convergencia de malla

El análisis de convergencia busca la selección de una malla, mediante la evaluación en algunos modelos creados con distintos elementos geométricos, variando sus refinamientos en diferentes capas, correspondientes a la profundidad del sustrato, o en todo el sólido, con el objetivo de obtener resultados que garanticen comportamientos confiables de las magnitudes de salida, a lo largo del rayado, sobre las regiones de las microestructuras.

De igual manera, el control en los diferentes modelos de mallados, se lleva a cabo mediante la cuantificación en los tiempos de simulación, estableciendo una cantidad de nodos y elementos para las creaciones de las 6 mallas que se observan en un paso a continuación, por medio del corte A-A, de la figura 3-5-1



Figura 3-5-1: Corte A-A' Microestructura seleccionada



Fuente: Propia

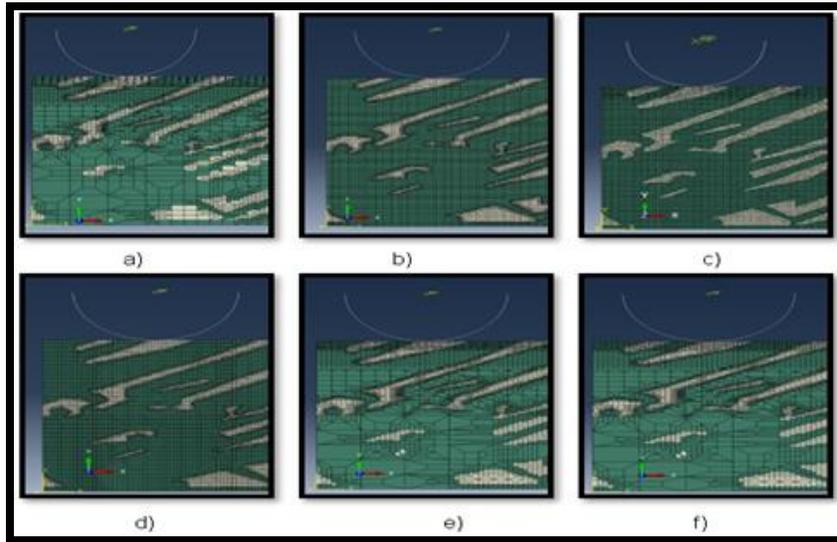
3.5.1 Modelos de mallado

Se crean 6 modelos de mallado con refinamientos en las diferentes capas del sustrato con las figuras geométricas regulares evaluadas (Triángulos, rectángulos y cuadrados) y se realiza un corte A-A' de dichos sistemas de mallado una distancia de $10\ \mu\text{m}$ de largo (ver figura 3-5-1-1). Las condiciones establecidas para las simulaciones de los modelos (a-f) corresponden a una longitud de rayado de $40\ \mu\text{m}$ con una carga de $0,5\ \text{N}$ y coeficiente de fricción de $0,1$. Esta longitud del rayado se establece con dicho valor, puesto que la región del grano en donde se encuentran los microconstituyentes está conformada por un sustrato de $50\ \mu\text{m}$ de largo.

Por otro lado, según la norma ASTM E-18-03 [39] para ensayos que involucran indentación se debe respetar de 2,5 a 3 veces la región del contacto del indentador desde el borde inicial con respecto al primer punto de contacto con el sustrato, como se citó en la sección 3.4.3 (módulo de ensamblaje), con el fin de evitar agrietamientos prematuros en los bordes del material. Por tal razón se deja $3\ \mu\text{m}$ de distancia en los dos extremos del sustrato, proporcionándose un rayado de $40\ \mu\text{m}$ y garantizando que no se genera ningún fenómeno externo.



Figura 3-5-1-1: Corte A-A' Microestructura modelos de mallados



Fuente: Propia

Las figuras Geométricas utilizadas en los modelos de mallado para la convergencia se observan en la tabla 3-5-1-1. Los elementos con geometrías triangulares y cuadrados mostraron durante el contacto indentador - sustrato mayor rigidez, en comparación a los elementos rectangulares. Esta última geometría es la que mejor describe los ensayos experimentales computacionales para este estudio, ya que el mapeo de esfuerzos que se genera por capas representadas bajo cambio de colores es más homogéneo que las geometrías anteriores (triángulos y cuadrados). Cualitativamente se tiene un comportamiento similar en una la investigación realizada en la universidad católica de Chile por Claudio Garcia [43] titulado “Análisis de diferentes tipos de elementos finitos sometidos a grandes deformaciones elasto plasticas”, en donde se concluye que son los elementos de forma rectangular los que soportan mayor deformación y mejor comportamiento en modelos Elastoplasticos

Tabla 3-5-1-1. Modelos y elementos de la malla

Modelo	Figura geométrica	Base (μm)	Altura (μm)	Diagonal (μm)
a	Rectángulo	0,020087	0.011608	0
b	cuadrado	0.100103	0.100103	0
c	Triangulo	0.095854	0.095854	0.142692
d	cuadrado	0.079887	0.079887	0
e	Rectángulo	0.06026	0.034822	0
f	Triangulo	0.060261	0.034822	0.069599

La tabla 3-5-1-2, compara los diferentes modelos creados, por medio de los valores de tiempo de simulación, cantidad o número de elementos y valor del esfuerzo de Von Mises (GPa) evaluados sobre el mismo punto (coordenada) en una región particular al interior del sustrato.



Tabla 3-5-1-2: Modelos y convergencia de la malla

Modelos	# Nodos	# Elementos	Tiempo(h)	Esfuerzo (GPa)	Error (%)
a	154659	126153	35,08	1,81	1,63
b	85476	92246	15,42	1,94	5,32
c	105671	85386	9,05	2,15	16,88
d	79577	94182	9,71	1,55	16,07
e	125464	89757	17,43	2,10	14,07
f	182457	136457	40,23	1,84	Valor ideal

Fuente: Propia

3.5.2 Selección de la malla

Según la teoría de los elementos finitos, las mallas con mayor refinamiento son las que mejores resultados entregan, sin dejar de un lado la selección de la geometría del elemento, el costo computacional (tiempo (h)) y su porcentaje de error comparado con el modelo ideal. Para hallar este último se tienen como limitantes el procesador y la memoria RAM durante el desarrollo de la simulación, por lo tanto, el máximo refinamiento de malla que puede entregar el equipo se establece en función de sus características, como son el tiempo de procesamiento y su tamaño en el archivo de salida, las especificaciones del equipo se observan a continuación en la tabla 3-5-2-1.

Tabla 3-5-2-1: Especificaciones del equipo de procesamiento

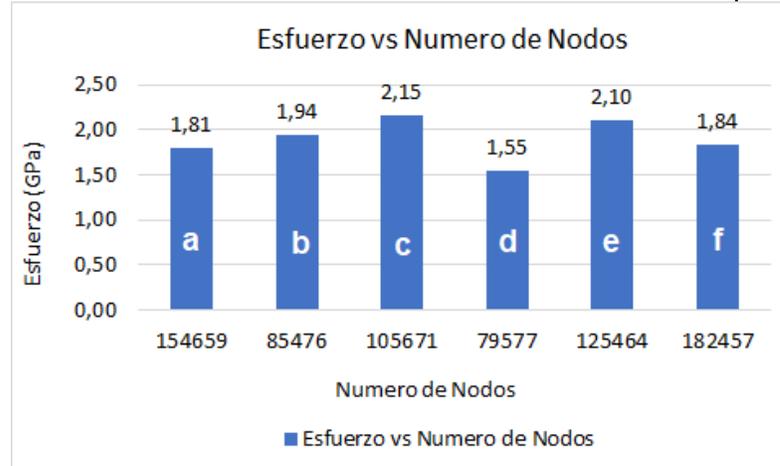
Característica del equipo	
Procesador	Intel Xeon W-2145 CPU
Frecuencia de procesamiento	3,70 GHz
Memoria RAM	64 GB
Tipo de memoria RAM	GDDR5
Numero Núcleos	8
Tarjeta grafica	NVIDIA Quadro K1200
Tamaño de tarjeta grafica	6 GB
Tamaño del Disco Duro	1,8 TB

Fuente: Propia



El diagrama de barras de la figura 3-5-2-1 muestra la información del esfuerzo de Von Mises y el número de nodos realizado para cada uno de los modelos evaluados, en donde se define la letra f, como la malla ideal con el máximo refinamiento entregado por el equipo, las magnitudes más cercanas a dicho valor ideal corresponden al modelo a y b.

Figura 3-5-2-1: Esfuerzo de Von Mises vs cantidad de nodos por modelo



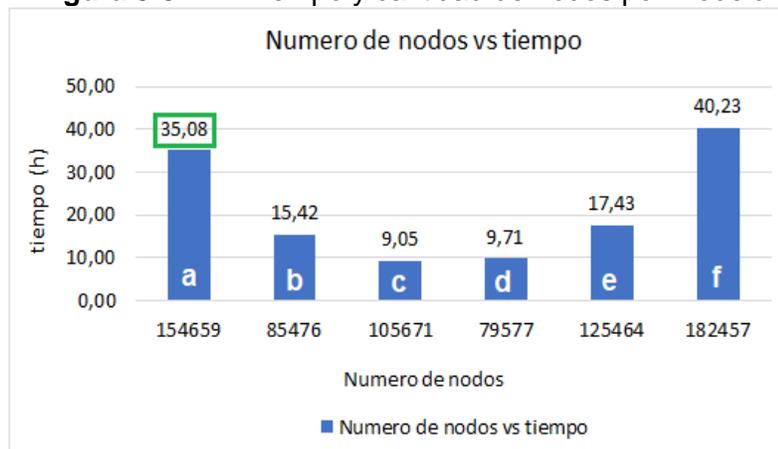
Fuente: Propia

A continuación, se grafica el tiempo y la cantidad de nodos, con el fin de observar cuales de las magnitudes están más próxima al modelo ideal, teniendo en cuenta un menor costo computacional, correspondiente a tiempo de simulación y tamaño en el archivo de salida.



El modelo de la malla con letra “a” entrega un valor de esfuerzo de 1,81 GPa con un error del 1,63 %, en comparación al valor ideal, lo que es aceptable según la investigación “estudios de pandeo en plastificación compuesta laminada por FEM utilizando Abaqus como software modelo” [44], dentro del cual se afirma que al estar por debajo del 2% del error del valor esperado por el modelo ideal la malla presenta convergencia en el sistema. De igual manera, Su tiempo de simulación es de 35,08 horas (ver figura 3-5-2-2), es decir 5,15 horas menor a el modelo de referencia. El tipo de elemento, con el cual fue construido esta malla pertenece a un elemento del tipo CPS8 compuesto por una geometría rectangular y un método de solución cuadrático, logrando adaptarse de mejor manera a los ensayos de rayado con carga progresiva, en donde se estudia el comportamiento de los esfuerzos y las deformaciones en el plano, según la librería del manual de Abaqus para sistemas en 2D [45].

Figura 3-5-2-2: Tiempo y cantidad de nodos por modelo

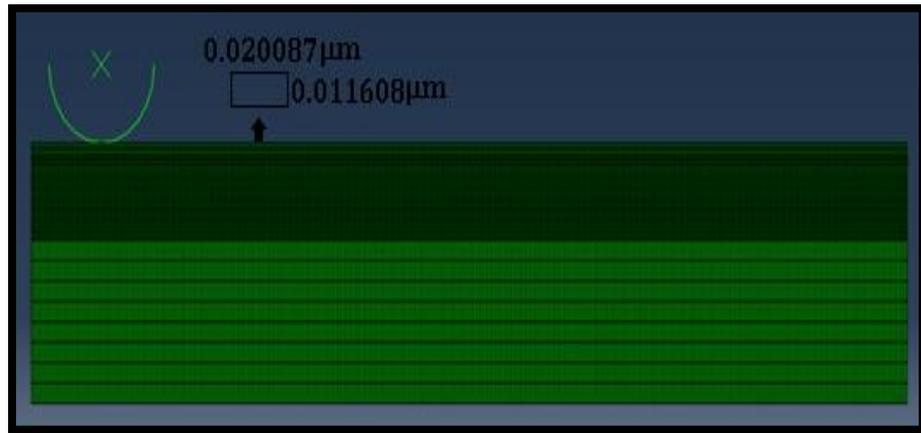


Fuente: Propia

3.6. Creación del modelo ideal

La creación del modelo ideal sigue los mismos pasos del subcapítulo 3.4” creación del modelo en Abaqus” con la diferencia en que sus propiedades mecánicas para la creación del sustrato ideal solo estarán dadas para un material, correspondiente al microconstituyente con valor más alto, que para el caso será la Bainita superior, la cual caracteriza a el sustrato como si sus propiedades mecánicas se hubiesen adquirido luego del tratamiento térmico, por tanto, sus propiedades mecánicas (valores de la regiones Elasto-plásticas) son asignadas de la tabla 3-4-2-1

En este mismo orden de ideas, la malla se realiza en Abaqus por medio de la creación de elementos por capas de forma decreciente desde la parte inferior hasta la superficie de rayado, en donde se genera el mayor refinamiento a la misma profundidad que para la malla creada con los microconstituyentes en el subcapítulo 3.3, y con la misma medida de los elementos geométricos a nivel superficial., como se observa en la figura 3-6-1

**Figura 3-6-1:** Abaqus, Modelo ideal

Fuente: Propia

El modelo se crea para comparar y analizar, si existe efecto de ingresar al interior de un sustrato los microconstituyentes correspondientes a la microestructura obtenida por metalografía después de haberse realizado un tratamiento térmico. Esta influencia de la microestructura se contrasta por medio de los gráficos de esfuerzos y deformaciones entregados por Abaqus para los dos modelos.

Capítulo 4: Resultados

En la investigación se estudian 3 modelos, dentro de los cuales dos presentan microestructura al interior del sustrato, teniendo como única diferencia el tamaño del indentador. A su vez, se analiza un modelo restante denominado “sustrato ideal”, con los mismos parámetros de modelación del sistema constituido por el indentador de mayor radio.

Para sintetizar la citación de estos modelos en la sección de resultados, se crea la tabla 4.1, de los primeros dos modelos, con radios que corresponden a 3 μm y 1,7 μm , los cuales consideran la microestructura al interior del sustrato (Real).

Las gráficas complementarias de esfuerzos y deformaciones para los modelos de simulación estudiados en la tabla 4-1, se pueden observar con mayor detalle en el anexo B. Para este estudio, solo se analizará el gráfico de Von Mises, establecido como común denominador para la evaluación de los tres primeros parámetros de la investigación, puesto que dicha función abarca los esfuerzos resultantes presentes a lo largo del rayado, permitiendo estudiar la influencia de la carga, el coeficiente de fricción y el tamaño del indentador. El rango de cargas utilizado en el estudio obedece a un valor máximo y próximo al umbral recomendado de Antón Paar (1N), como lo es la carga de 0,8N. Es decir, al trabajar con un valor superior o igual al límite de carga, el modelo se convierte en un ensayo de microrayado. No obstante, el sustrato al tener una longitud máxima de 50 μm (largo) y una longitud de rayado de 40 μm , no admite cargas superiores a las del umbral, ya que se presenta alta tasa de deformación en el material, como consecuencia la falla durante el inicio del ensayo es inminente. Para el caso de 0.3N, al trabajar con valores inferiores a dicha magnitud se presenta el caso contrario, el mapeo de esfuerzo es tan fino inicialmente, que solo durante los últimos tramos de recorrido, se evidencia el efecto de la carga.

Tabla 4-1: Parámetros de evaluación en los modelos reales

Parámetros de evaluación	Descripción del radio	Sustrato	Radio (μm)	Simulación	Cargas normales (N)	Coefficientes de fricción	Gráfico de evaluación
Carga	Mayor (M)	Real	3	I	0,3	0,1	Von Mises
					0,5		
					0,8		
Coeficiente de fricción	Mayor (M)	Real	3	II	0,3	0	Von Mises
						0,1	
						0,2	
Tamaño del indentador	Mayor (M)	Real	3	III	0,3	0	Von Mises
					0,5		
					0,8		
	Menor (m)	Real	1.7	IV	0,3	0	Von Mises
					0,5		
					0,8		

Fuente: Propia

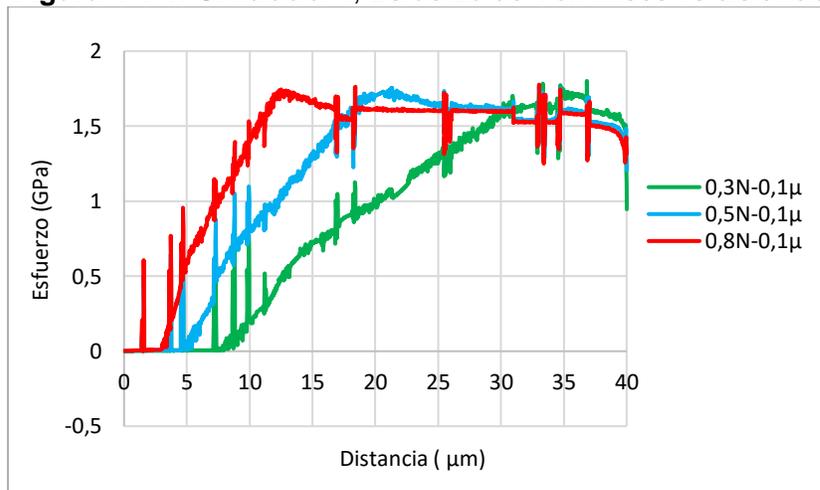


La evaluación de la carga y el coeficiente de fricción se lleva a cabo, con el indentador que posee el radio de $3 \mu\text{m}$, puesto que a diferencia del menor, está dentro de los rangos recomendados por la norma ASTM D 7187 citados en el subcapítulo 3.4.1. A su vez, dicho valor se encuentra dentro de los valores de protocolo establecidos en la investigación “caracterización para diferentes escalas de rayado” presente en el módulo correspondiente a creación de partes, mostrado anteriormente en la figura 3-4-1-2.

4.1 Efecto de la carga

Al mantenerse constante el coeficiente de fricción y aumentar la carga, las tres series de la figura 4-1-1 presentan mayores esfuerzos. Además, su primera perturbación se manifiesta sobre la misma distancia de recorrido para los tres casos, pero su oscilación varía de forma directa con el aumento de la carga, es decir que, si la carga es mayor, su perturbación u oscilación inicial también lo será antes de alcanzar el valor máximo de carga (esfuerzo). Una vez establecido el valor máximo de esfuerzo, el comportamiento se vuelve inverso, con mayor carga se presentan perturbaciones de menores esfuerzos sobre las regiones posteriores, donde el valor de menor de fuerza muestra los esfuerzos más altos hasta el final del ensayo.

Figura 4-1-1: Simulación I, Esfuerzo de Von Mises vs distancia



Fuente: Propia

4.2 Efecto del coeficiente de fricción

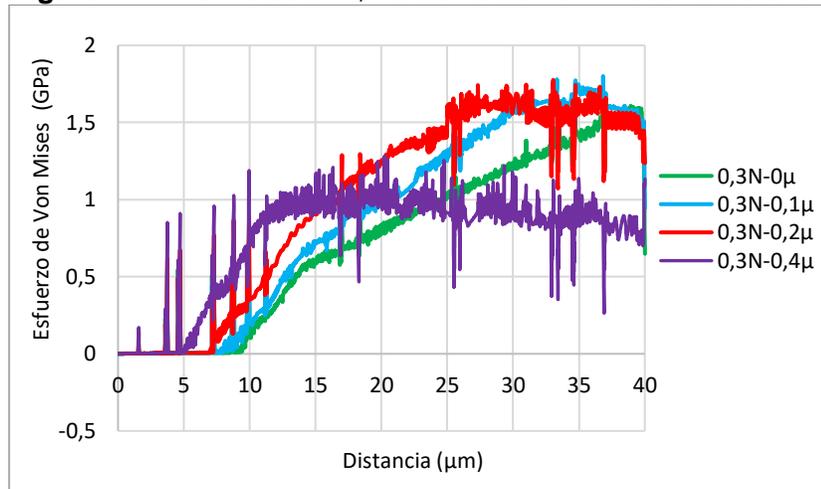
Para este caso, se deja constante la carga y se aumenta el coeficiente de fricción, observándose que para las tres series evaluadas (0,01 y 0,2) se presentan esfuerzos con mayor magnitud. No obstante, los picos o perturbaciones se manifiestan de igual manera en los tres casos a la misma distancia de recorrido y sus valores se vuelven más altos con el aumento del coeficiente de fricción previamente se alcanza el valor máximo de carga (ver figura 4-2-1). Posteriormente, la carga se establece como máxima, con el valor más alto en el esfuerzo y a partir de este punto, su comportamiento se vuelve inverso, por lo tanto, si se tiene mayor coeficiente de fricción sobre estas regiones, los esfuerzos decrecen.



para cada función desde el valor de coeficiente mayor hasta el menor (0-0,2), mostrando en este ultimo los valores más altos de esfuerzos.

El coeficiente de fricción de 0,4 se comporta de igual manera que los tres modelos anteriores, en lo correspondiente a la aparición de las perturbaciones dentro de los mismos rangos de distancia, manteniendo en un principio oscilaciones en los esfuerzos con magnitudes mayores que los casos anteriores. Sin embargo, después de los 15 μm de recorrido, su esfuerzo disminuye y decrece en mayor proporción que los demás coeficientes.

Figura 4-2-1: Simulación II, Esfuerzo de Von Mises vs distancia



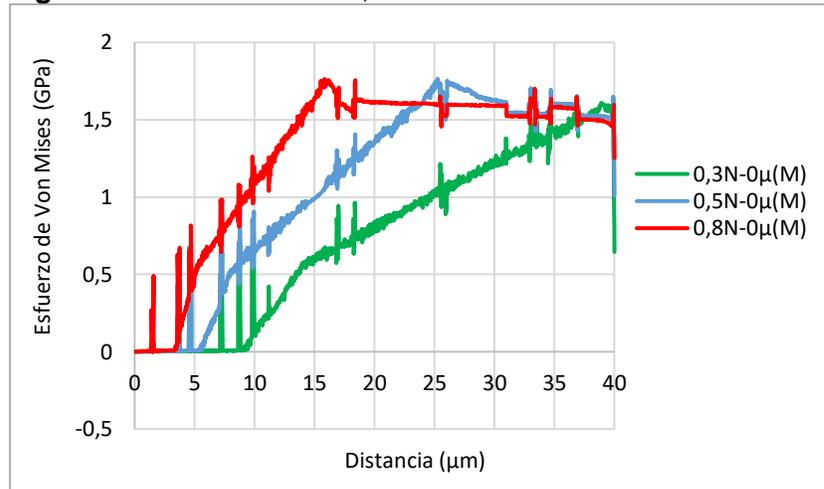
Fuente: Propia

4.3 Efecto del tamaño del indentador

Los valores de las tres series de la figura 4-3-1 para el indentador con mayor radio (M) presentan el mismo comportamiento característico que el descrito en la figura 4-1-1 de la simulación I. En constaste, cuando el coeficiente es menor y la carga normal toma valores más grandes en magnitud, las funciones tardan más tiempo en alcanzar su valor máximo de esfuerzo como se observa en la figura 4-3-1 para las tres funciones comparadas con la figura 4-1-1.



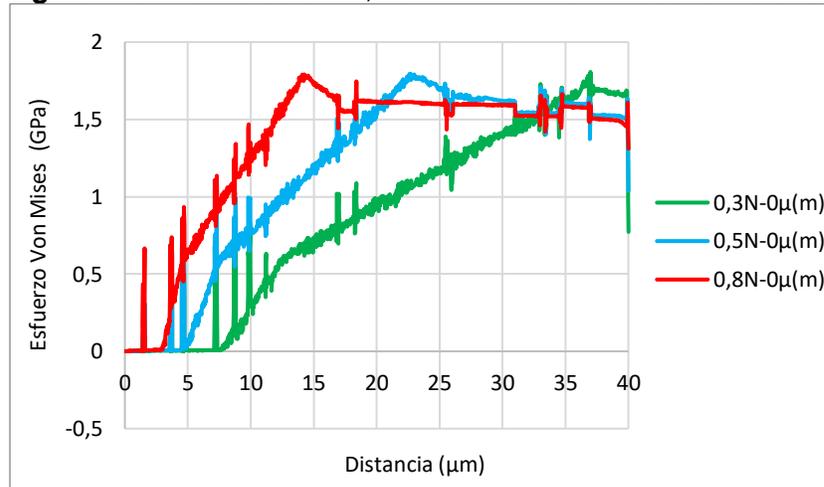
Figura 4-3-1: Simulación III, Esfuerzo de Von Mises vs distancia



Fuente: Propia

Como se ha venido observando en las simulaciones anteriores (I,II,III), los comportamientos de las funciones presentan características muy similares en la manifestación de picos con el incremento proporcional de la carga, el coeficiente de fricción o en su defecto de las dos variables, sobre las regiones previas al establecimiento del esfuerzo máximo. Sin embargo, las regiones posteriores al punto máximo de esfuerzo se comportan de forma inversa. La figura 4-3-2 muestra que, al disminuir el tamaño del indentador, los esfuerzos, presentan como tendencia el llegar a su valor máximo a una menor distancia de recorrido, y su comportamiento es similar al descrito previamente para la simulación I

Figura 4-3-2: Simulación IV, Esfuerzo de Von Mises vs distancia



Fuente: Propia



4.4 Efecto de la Microestructura

De igual manera, un último resultado que se presenta correspondiente a el efecto de la microestructura, por medio de la tabla 4-4-1, muestra los parámetros tenidos en cuenta para la evaluación de las simulaciones realizadas con los sustratos ideal y real.

Tabla 4-4-1: Parámetros de evaluación en los sustratos ideales y reales

Parámetros de evaluación	Descripción del radio	Sustrato	Radio (μm)	Simulación	Cargas normales (N)	Coefficientes de fricción	Gráfico de evaluación
Efecto de la microestructura	Mayor (M)	Ideal	3	V	0,5	0,1	Von mises
							S11
							S22
							Máximo Principal
							Mínimo principal
							Deformación plástica en x PE (11)
							Deformación Equivalente (PEEQ)
	Mayor (M)	Real	3	VI	0,5	0,1	Von mises
							S11
							S22
							Máximo Principal
							Mínimo principal
							Deformación plástica en x PE (11)
							Deformación Equivalente (PEEQ)

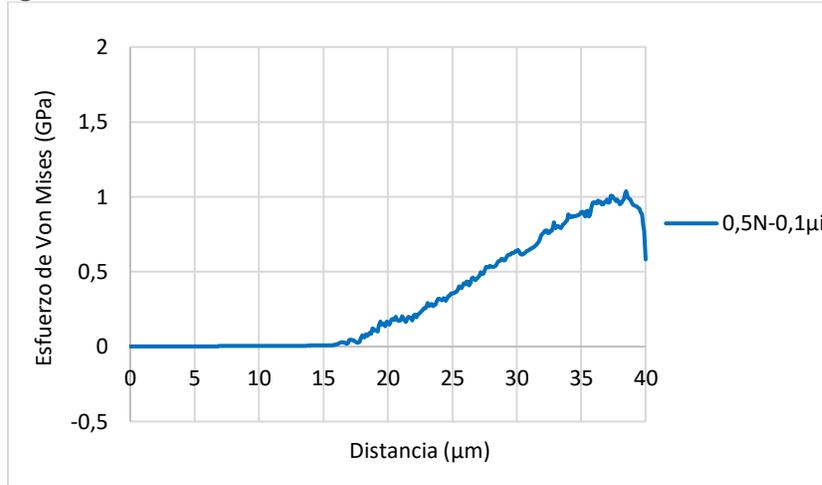
Fuente: Propia



4.4.1 Modelos Ideales

El incremento de la fuerza dentro de los primeros 16,20 μm de recorrido, no presenta cambio en la magnitud del esfuerzo dentro de la gráfica de Von mises, es decir se observa que su valor se mantiene constante (ver figura 4-4-1-1). A partir de dicho punto, la función asciende de forma proporcional con el aumento del esfuerzo hasta el final del recorrido, estableciendo un valor máximo de 1,04 GPa a los 38,40 μm . Cabe resaltar, que en sus últimos 1,6 μm de distancia, el esfuerzo decrece, cuando el indentador pierde parte de su carga para conseguir retirarse del sustrato.

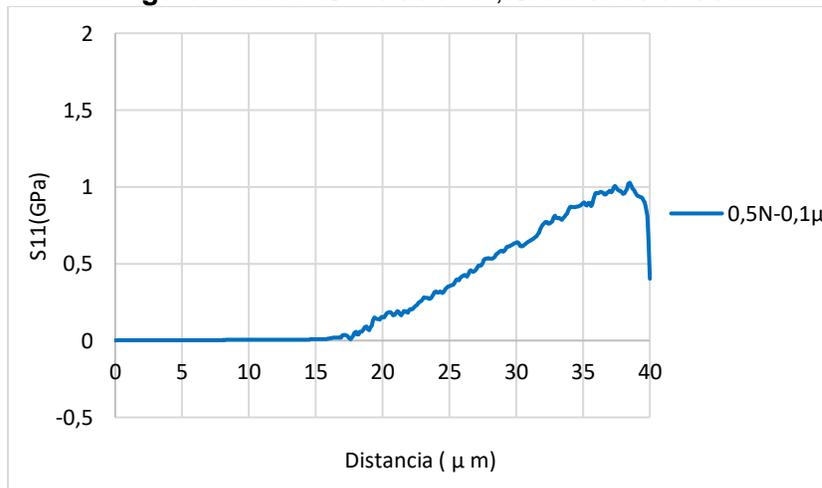
Figura 4-4-1-1: Simulación V, Esfuerzo de Von Mises vs Distancia



Fuente: Propia

Al igual que en el caso anterior en el esfuerzo S11, su grafica se mantiene constante con el aumento progresivo de la carga hasta 16,20 μm , desde este punto su valor de esfuerzo incrementa de forma proporcional, hasta el final del recorrido, mostrando un valor máximo de 1,03 GPa a una distancia de 38,50 μm como se observa en la figura 4-4-1-2

Figura 4-4-1-2: Simulación V, S11 vs Distancia

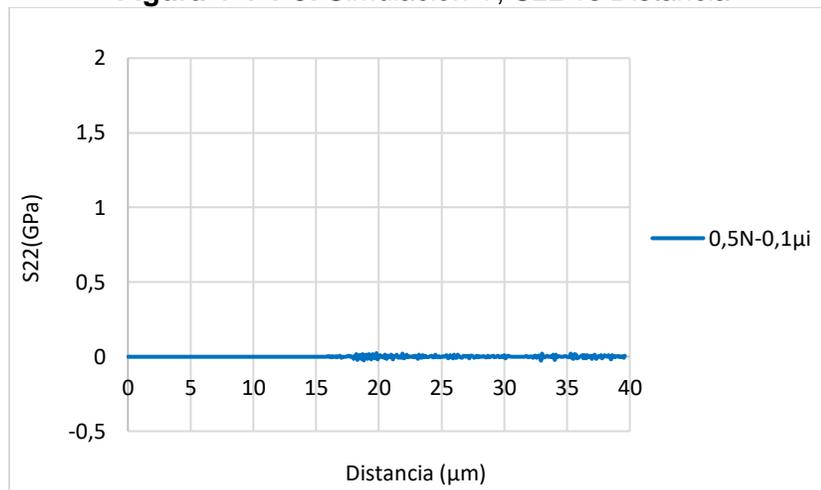


Fuente: Propia



Paralelamente, al observar la gráfica del esfuerzo S22, sus valores se mantienen constantes hasta 16,20 μm . No obstante, posteriormente a dicho punto, se presenta un incremento en el esfuerzo con un valor mínimo de 0,017 GPa a los 18,20 μm , y de igual manera una magnitud máxima de -0,027 GPa a los 33,90 μm (ver figura 4-4-1-3), estableciéndose oscilaciones características por manifestar crecimiento y decrecimiento de la función, hasta el final del ensayo.

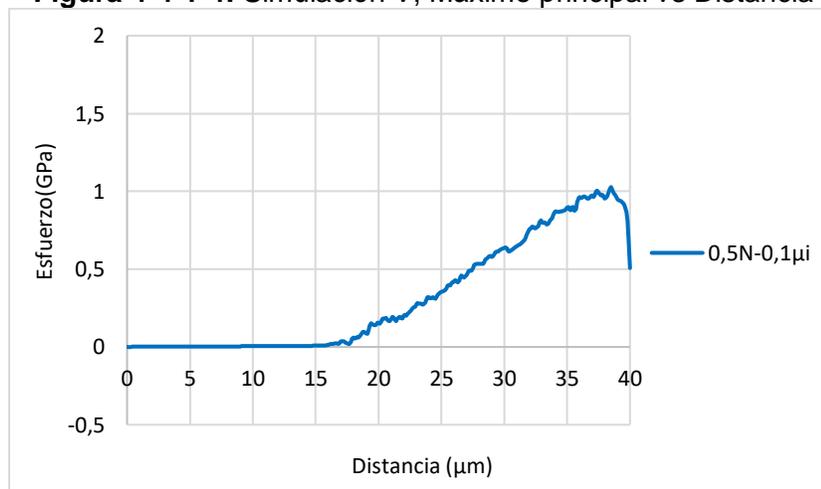
Figura 4-4-1-3: Simulación V, S22 vs Distancia



Fuente: Propia

Para el esfuerzo máximo principal, se observa inicialmente un comportamiento constante hasta 16,20 μm , con el incremento de la carga. A continuación, el valor del esfuerzo aumenta de forma proporcional hasta el final del recorrido, alcanzando un valor máximo de 1,03 GPa a una distancia 38,50 μm .

Figura 4-4-1-4: Simulación V, Máximo principal vs Distancia



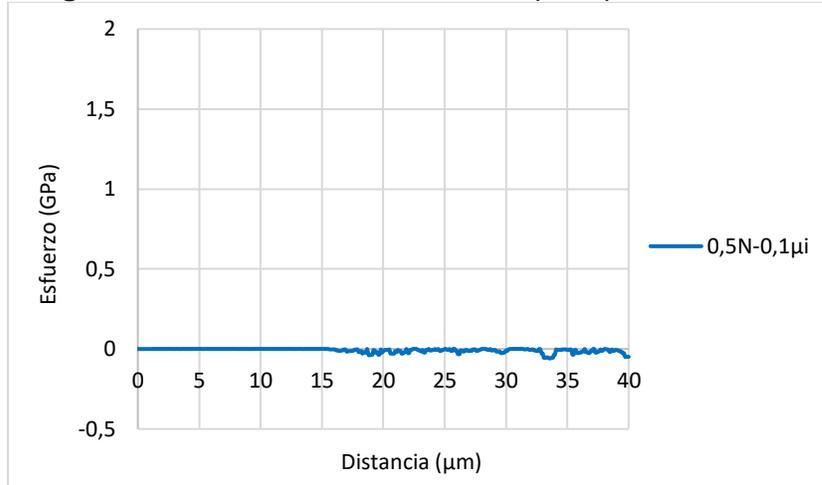
Fuente: Propia

De igual manera, el esfuerzo mínimo principal se manifiesta en los primeros 16,20 μm de manera constante. Posteriormente a dicho punto, su esfuerzo presenta oscilaciones y su



valor máximo se alcanza con una magnitud de $-0,06$ GPa a $33,60 \mu\text{m}$, como se observa en la figura 4-4-1-5

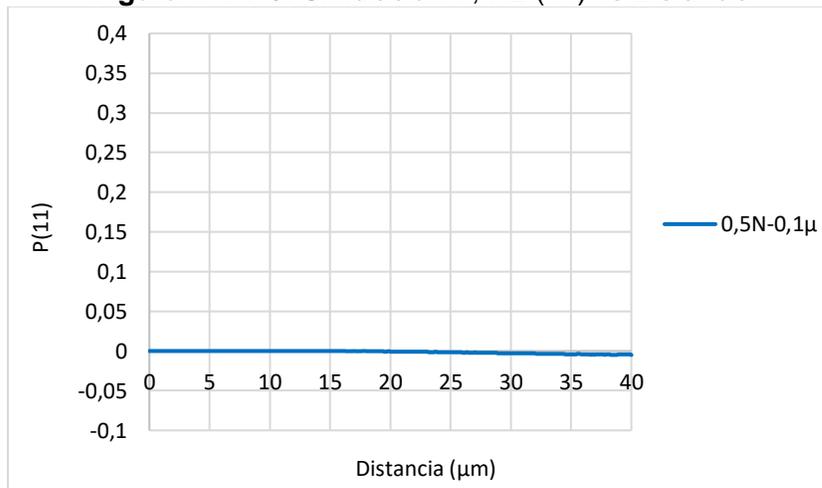
Figura 4-4-1-5: Simulación V, Mínimo principal vs Distancia



Fuente: Propia

Por otro lado, la deformación plástica en el plano x, es constante a una distancia de recorrido dentro del rango de ($0 \mu\text{m} - 16,20 \mu\text{m}$). A partir de este punto, su valor aumenta de forma proporcional, presentando oscilaciones con un valor máximo establecido de $-0,0050$ en deformación plástica a los $38,70 \mu\text{m}$.

Figura 4-4-1-6: Simulación V, PE (11) vs Distancia

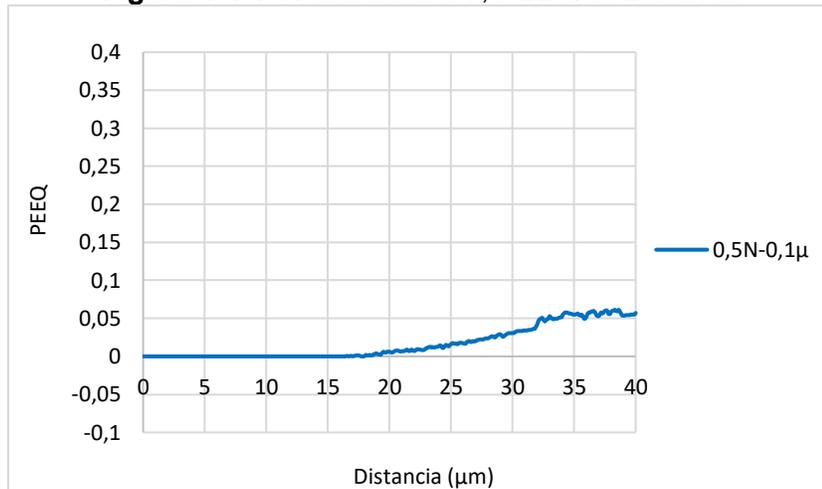


Fuente: Propia

Finalmente, la deformación plástica equivalente presenta un comportamiento constante dentro de un rango ($0 \mu\text{m} - 15 \mu\text{m}$), manifestando un incremento de forma proporcional ascendente con comportamiento característico oscilante bajo, estableciendo un valor máximo en deformación de $0,061$ a una distancia de $38,60 \mu\text{m}$, como se observa en la figura 4-4-1-7.



Figura 4-4-1-7: Simulación V, PEEQ vs Distancia

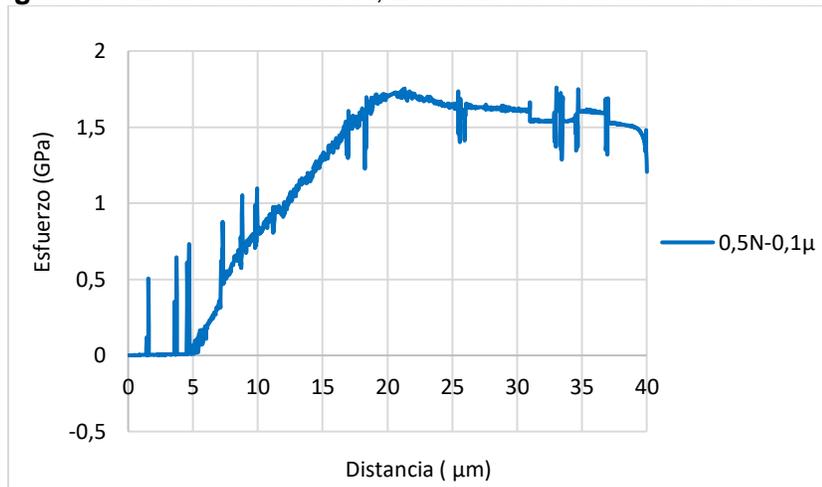


Fuente: Propia

4.4.2 Modelos Reales

Las perturbaciones que presentan mayor oscilación en el gráfico de Von Mises se manifiestan al inicio del recorrido en el rango (0 μm - 4,7 μm) con un valor máximo de 0,73 GPa. Posteriormente, la función presenta crecimiento de forma ascendente con el aumento del esfuerzo hasta los 21 μm y a partir de este punto decrece, presentando perturbaciones con valores cercanos de esfuerzos entre sí, hasta el final del recorrido como se observa en la figura 4-4-2-1

Figura 4-4-2-1: Simulación VI, Esfuerzo de Von Mises vs Distancia



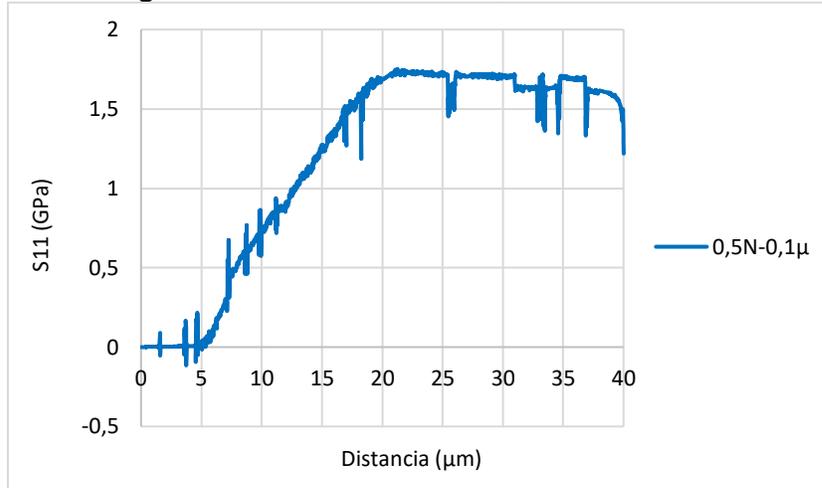
Fuente: Propia

Para el esfuerzo S11, se presentan perturbaciones con oscilaciones que toman valores de esfuerzos negativos en los primeros 4,6 μm de recorrido, con magnitud mínima correspondiente de -0,11 GPa en 3,76 μm (ver figura 4-4-2-2). Luego de los 4,6 μm de distancia, la gráfica asciende de forma proporcional con el incremento del esfuerzo hasta los 21 μm, en donde su valor de perturbación oscilante máximo sobre la región en ascenso



alcanza un valor de 0,67 GPa a 7,25 μm . Una vez superado los 21 μm , los valores de oscilación en los picos, se manifiestan con valores cercanos entre sí, hasta el final del recorrido.

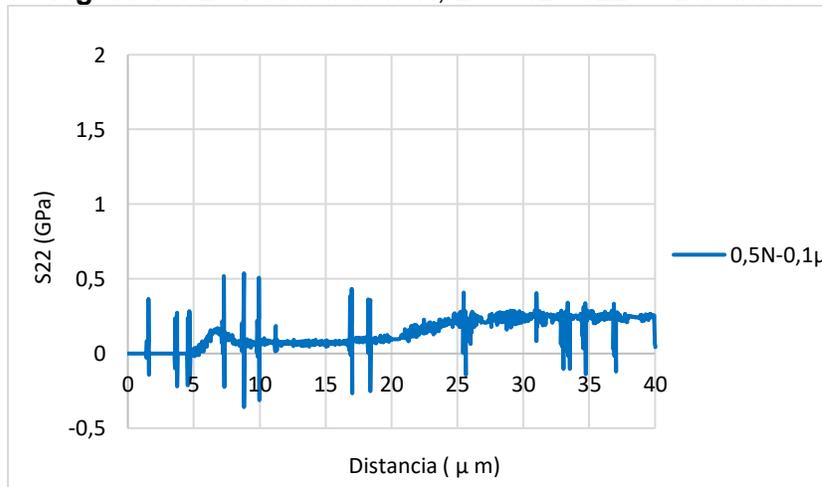
Figura 4-4-2-2: Simulación VI, S11 vs Distancia



Fuente: Propia

De igual manera, los esfuerzos S22, muestran perturbaciones oscilatorias en los valores de esfuerzo durante todo el recorrido. Sin embargo, su valor máximo y mínimo se establece en 8,8 μm con magnitudes de esfuerzos perteneciente a 0,54 GPa y -0,36 GPa. Posteriormente al sobre pasar estos 8,8 μm , la función asciende de forma proporcional con el aumento del esfuerzo, y a medida que se acerca a la distancia final del rayado, sus perturbaciones oscilan cada vez con menores valores negativos, cómo se observa en la figura 4-4-2-3.

Figura 4-4-2-3: Simulación VI, Esfuerzo S22 vs Distancia



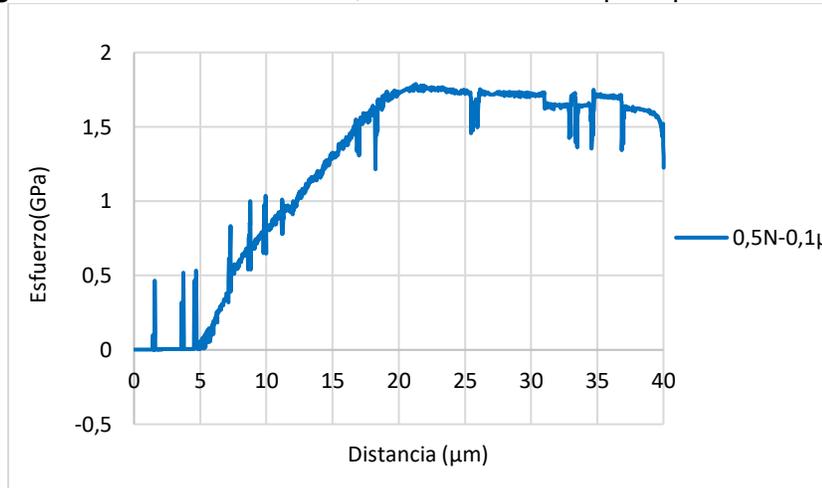
Fuente: Propia

El comportamiento del esfuerzo máximo principal, se caracteriza inicialmente por presentar perturbaciones positivas con un valor máximo de 0,53 GPa en los primeros 4,70 μm . A



partir de este punto su grafico crece de forma proporcional estableciendo su valor máximo en 21 μm , y presentando sobre el recorrido de esta región una perturbación oscilante máxima de 1 GPa correspondiente a 8,80 μm . Las regiones siguientes después de los 21 μm , se diferencian a las anteriores por tener un comportamiento, en donde la gráfica se estabiliza en un valor de esfuerzo y sus perturbaciones oscilan, con valores cercanos entre sí, como se observa en la figura 4-4-2-4

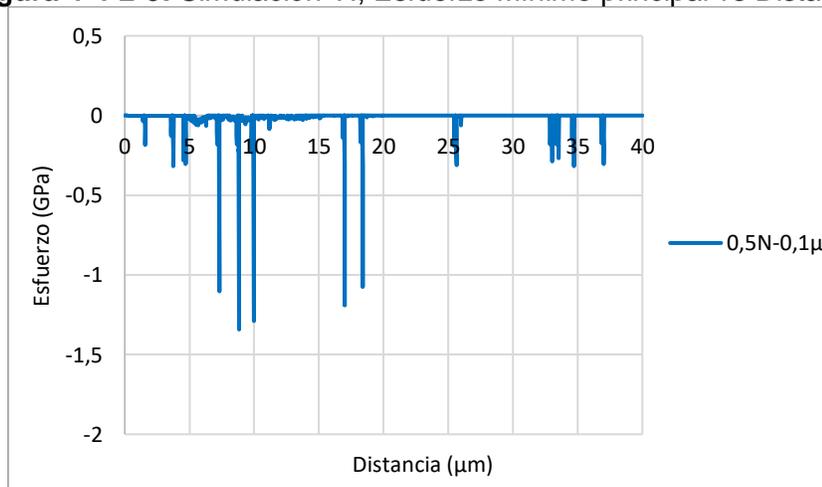
Figura 4-4-2-4: Simulación VI, Esfuerzo Máximo principal vs Distancia



Fuente: Propia

Para el esfuerzo mínimo principal se presentan manifestaciones de perturbaciones durante la mayor parte del recorrido, su valor máximo se establece con una magnitud de -1,34 GPa a 9 μm de distancia, y posteriormente a este punto, su esfuerzo decrece con magnitudes oscilantes cada vez menores hasta los 36 μm de recorrido, en donde dicho valor de esfuerzo se vuelve 0 y se mantiene constante hasta el final del ensayo (40 μm), como se observa en la figura 4-4-2-5

Figura 4-4-2-5: Simulación VI, Esfuerzo Mínimo principal vs Distancia

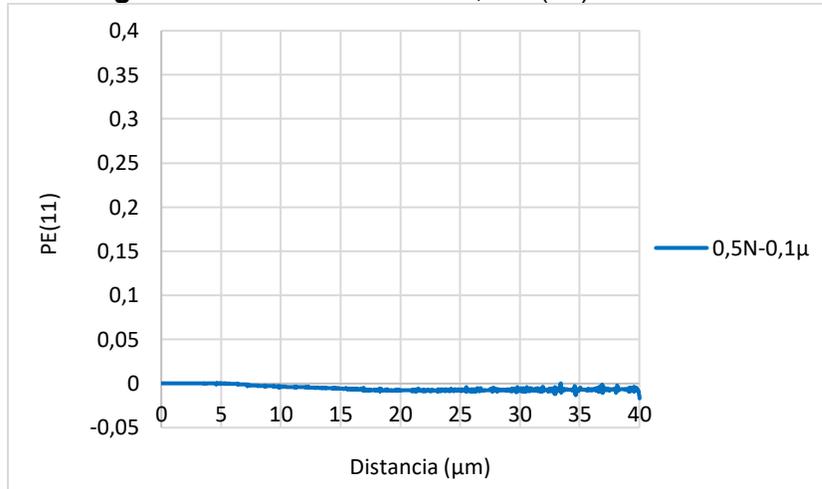


Fuente: Propia



La deformación plástica en el plano x, se mantiene constante en los primeros 6 micrómetros de recorrido, luego su valor crece de forma proporcional hasta los 18 μm , presentando picos con una baja oscilación sobre este tramo. Posteriormente, sus perturbaciones se muestran con mayor repetitividad hasta el final del ensayo, estableciendo un valor máximo de deformación en 0,013 a 34,67 μm de recorrido, con valores mayores que las observadas en el tramo de (6 μm -18 μm), nombrado anteriormente para la misma figura 4-4-2-6.

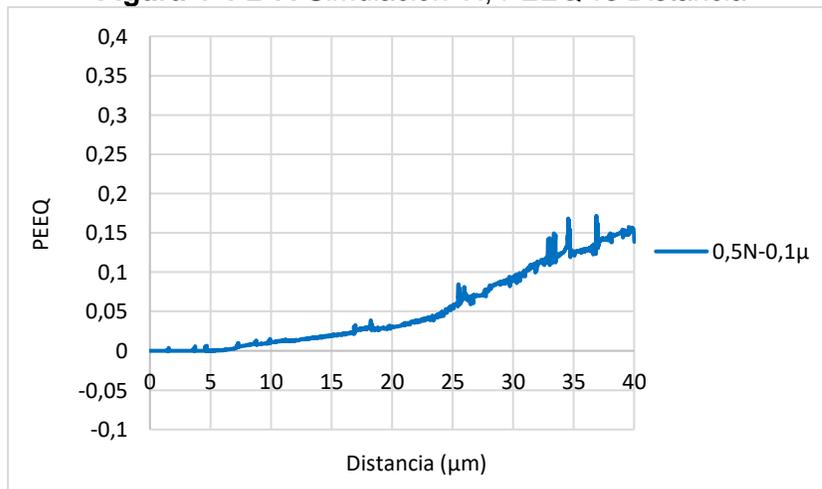
Figura 4-4-2-6: Simulación VI, PE (11) vs Distancia



Fuente: Propia

Finalmente, para la deformación equivalente, se tiene durante los primeros 5 μm un valor en la deformación equivalente de manera constante, con una perturbación máxima de 0,0056 a los 4,56 μm sobre dicha región. A continuación, la gráfica aumenta de forma proporcional hasta los 40 μm mostrando una perturbación oscilante máxima en la deformación, con magnitud de 0,17 a una distancia de 36,86 μm , como se observa en la figura 4-4-2-7.

Figura 4-4-2-7: Simulación VI, PEEQ vs Distancia



Fuente: Propia

Capítulo 5: Análisis de Resultados

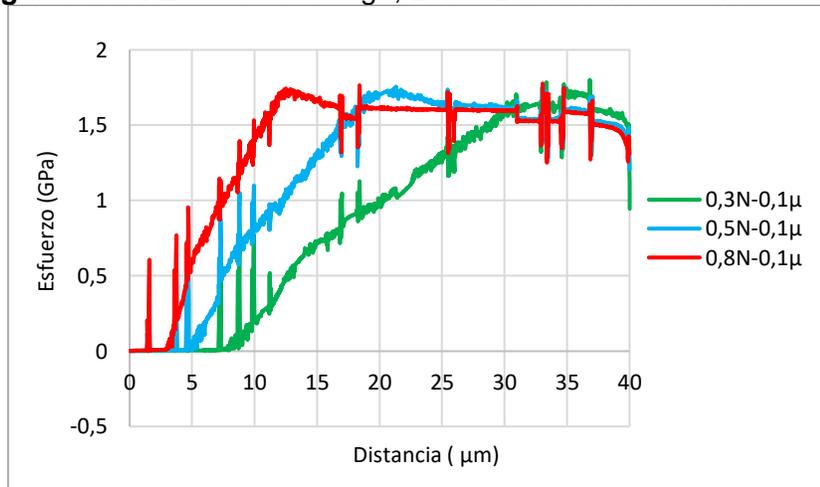
En el análisis de resultados, se explica y se compara los parámetros de evaluación citados en la tabla 4-1 y 4-4-1 perteneciente a la sección de resultados, correspondientes a las simulaciones (I, II, III, IV, V y VI), dentro de las cuales se muestran las distintas formas de evaluación de los modelos a partir del efecto generado por la carga, el coeficiente de fricción, el tamaño del indentador, en los sustratos reales.

De igual manera, estas tablas presentan los parámetros con los cuales se estudiará el efecto de la microestructura, mediante la comparación de sustratos reales e ideales a partir de las gráficas de esfuerzos y deformaciones, entregadas por el software ABAQUS.

5.1 Análisis de carga

Los valores de esfuerzos alcanzados en el punto máximo de crecimiento de la carga en las series pertenecientes a la figura 5-1-1, muestran magnitudes cercanas a la función que posee mayor carga (0,8N-0,1 μ).

Figura 5-1-1: Efecto de la carga, Esfuerzo de Von Mises vs distancia

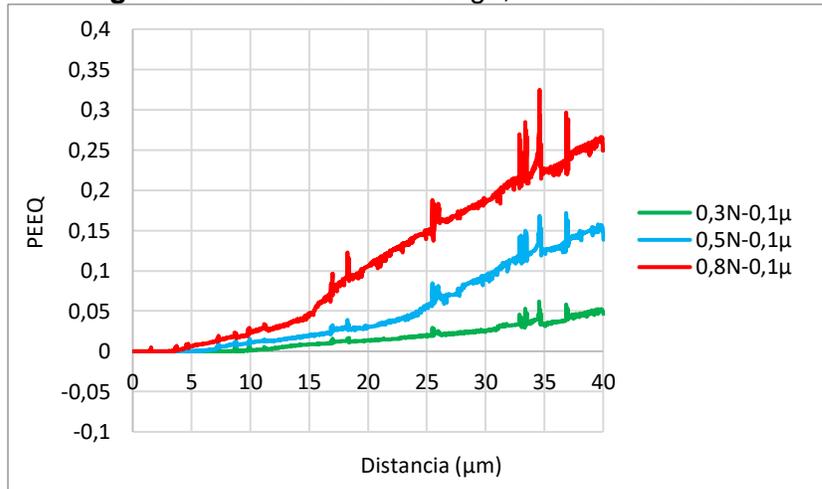


Fuente: Propia

Sin embargo, su efecto específicamente se da en la distancia de recorrido referente necesaria para alcanzar el valor máximo de esfuerzo, puesto que, al usar mayor carga, se establece particularmente dicha magnitud máxima a una menor distancia de recorrido. Esto ocurre debido a que el material fluye de manera más rápida de forma creciente como se observa en la figura 5-1-2 en la deformación plástica equivalente, para las series de la figura 5-1-1 estudiadas.



Figura 5-1-2: Efecto de la carga, PEEQ vs distancia

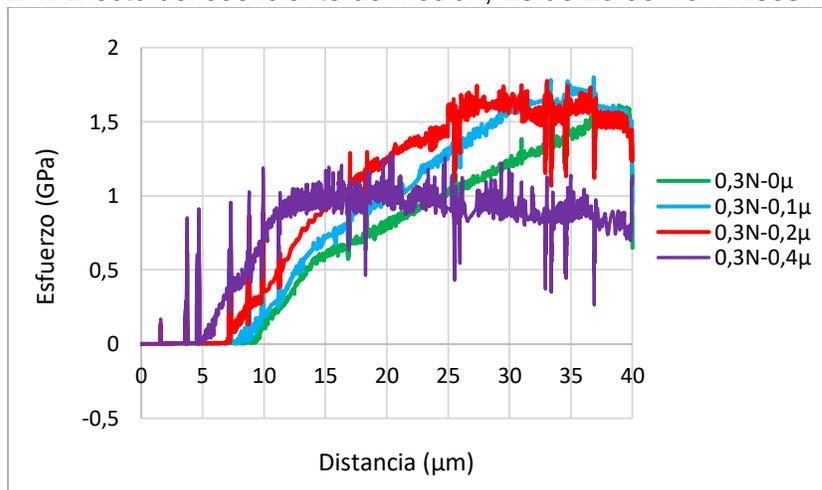


Fuente: Propia

5.2 Análisis del coeficiente de fricción

Las tres series (0μ , $0,1\mu$ y $0,2\mu$) muestran valores de esfuerzos máximos cercanos entre sí, al interior de la figura 5-2-1. No obstante, su efecto se evidencia al igual que para el caso anterior en la distancia referente en la cual se establece dicho esfuerzo máximo, entre mayor sea es el valor de la magnitud evaluada (coeficiente de fricción) más rápido se establece el esfuerzo máximo. Sin embargo, su caracteriza particular de sus funciones se da, en la separación que presentan cada una de las series, la cual es menor que para el caso evaluado anteriormente con el efecto de la fuerza normal

Figura 5-2-1: Efecto del coeficiente de fricción, Esfuerzo de Von Mises vs distancia



Fuente: Propia

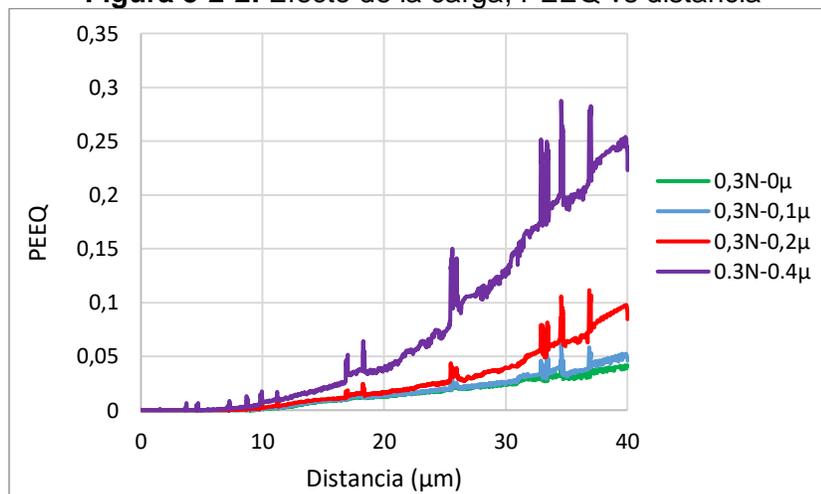
La razón por la cual esta manifestación máxima del esfuerzo se da en una distancia menor en comparación a las demás series, es debido a que entre más se aumente el coeficiente de fricción, mayores deformaciones plásticas equivalente se obtiene durante todo el recorrido de manera creciente, como se observa en la figura 5-2-2. Cabe resaltar que al



igual que para el esfuerzo de Von Mises sus graficas son muy cercanas entre sí, debido a que cuando la fuerza normal es menor en magnitud al coeficiente de fricción, el indentador no puede deslizar con la misma versatilidad, que cuando se presenta el caso contrario, ya que la carga normal no supera en mayor proporción a el valor del coeficiente de fricción durante el rayado, generando deformaciones próximas entre sí, como se evidencia en las series de la figura 5-2-2

Por otro lado, existe un caso particular para el coeficiente de 0.4, debido a que, al presentar dicha magnitud, la variación de la carga alcanza una perturbación tan alta, que se supera la distorsión máxima que puede soportar el elemento (Crystal plasticity finite element) predeterminado por la librería de Abaqus [46], como consecuencia del incremento significativo simultaneo en la deformación plástica (ver figura 5-2-2) equivalente a lo largo de todo el rayado comparados con los tres modelos anteriores, saliéndose de esta forma de los valores o condiciones de frontera predeterminados establecidos por ABAQUS y presentando un comportamiento inverso a las demás series evaluadas en un rango de (0-0.3) [47]

Figura 5-2-2: Efecto de la carga, PEEQ vs distancia



Fuente: Propia

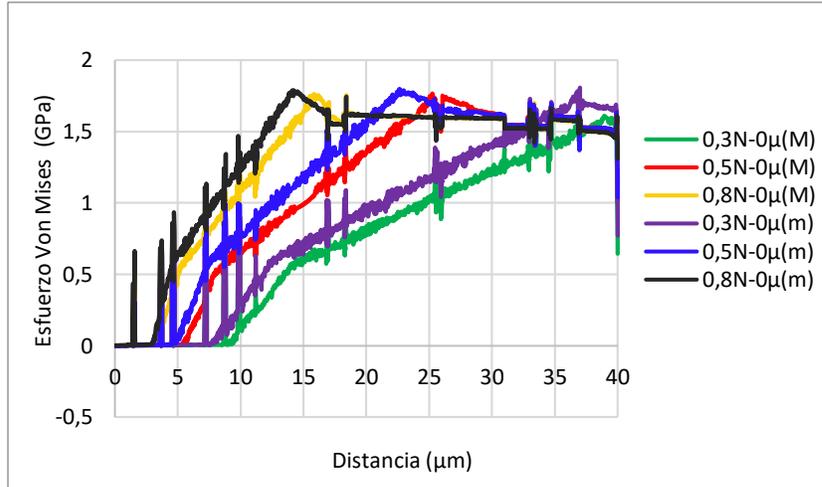
5.3 Análisis del tamaño del indentador

El comportamiento que se observa en las series de la figura 5-3-1, muestra la manifestación de perturbaciones o picos dentro de las mismas distancias, tanto para el indentador de radio mayor (M), como para el de menor (m). Sin embargo, para este último, sus esfuerzos presentan mayor magnitud en las tres funciones evaluadas bajo los mismos parámetros de carga.

Este fenómeno tiene lugar, puesto que al presentarse mayor área de contacto entre indentador - sustrato, menor esfuerzo normal se genera. Por tanto, para la partícula que tiene mayor radio se observa una penetración en el sustrato de forma menos significativa por su tamaño debido a que requiere menor esfuerzo, caso contrario ocurre para el observado en el indentador de menor radio (Ver figura 5-3-1).



Figura 5-3-1: Efecto del tamaño del indentador, Esfuerzo de Von Mises vs distancia



Fuente: Propia

El comportamiento para los dos indentadores, se rige cuantitativamente por medio de la ecuación de esfuerzo, generado por una carga normal, obtenida de un estudio de nano rayado “Perspectivas atómicas sobre el comportamiento de desgaste / fricción de ferrita nano cristalina durante el nano rayado por dinámica molecular” [48], en donde se evidencia la importancia del área de contacto para el incremento o la disminución del esfuerzo particularmente de un sustrato evaluado.

$$\sigma = \frac{F}{A} \quad \text{Ecuación (3)}$$

Donde:

F: Fuerza normal (N)

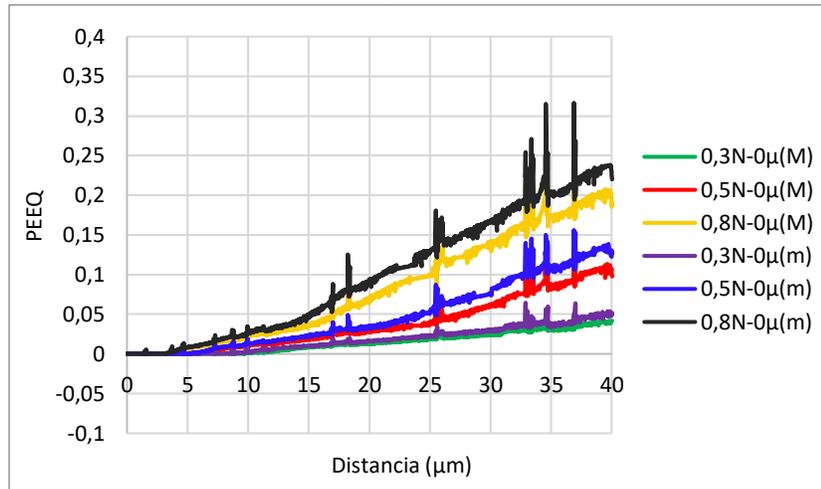
A: Área de contacto (mm²)

A continuación, si se toma un valor numérico de esfuerzo, entre los intervalos de carga creciente para cada una de las series de la figura 5-3-1 y se despeja su área, se comprueba lo afirmado anteriormente correspondiente, a la influencia del tamaño del radio, ya que para el que presenta menor radio, la gráfica alcanza esfuerzos más altos y su valor máximo se establece a menor distancia de rayado.

No obstante, para el indentador que se caracteriza por tener menor radio y presentar esfuerzos más altos, se observa un mayor incremento en las deformaciones equivalentes a causa del tamaño de la partícula y de la fuerza que esta ejerce, en comparación al de mayor radio, puesto que el primero requiere de más fuerza para poder indentar el sustrato, como se observa en la figura 5-3-2.



Figura 5-3-2: Efecto del tamaño en el indentador, Deformación plástica equivalente vs distancia



Fuente: Propia

5.4 Análisis del efecto de la microestructura

El pico observado en la gráfica naranja, muestra la manifestación de perturbaciones con oscilación de esfuerzos más altas para el modelo que considera la microestructura al interior del sustrato (Real), en comparación al modelo ideal (0,5N-0,1 μ i), cómo se observa en la figura 5-4-1. Esto se da, debido al cambio existente por parte del indentador hacia cada uno de los contornos de grano, en donde se presentan concentradores de esfuerzos [11], como consecuencia del diferencial presente en las propiedades mecánicas para cada uno de los microconstituyentes de la microestructura

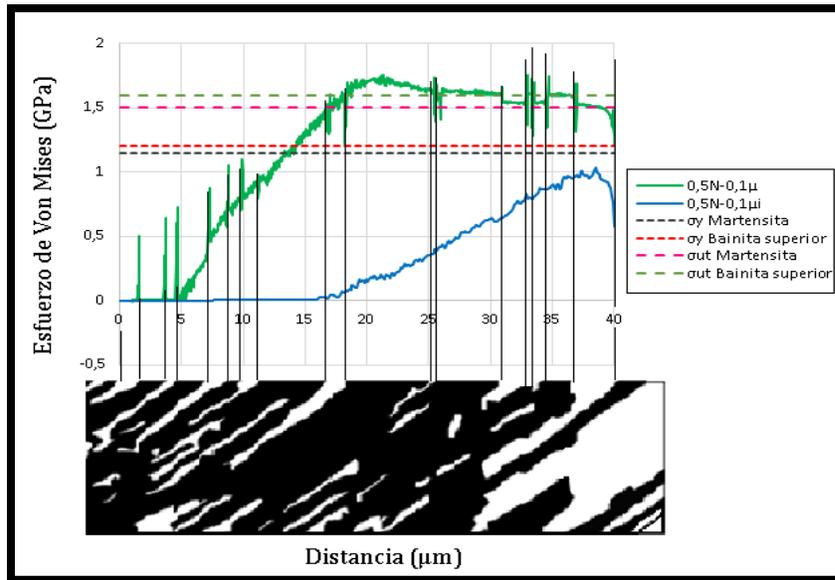
5.4.1 Esfuerzo de Von Mises

Cuando el esfuerzo de trabajo supera el esfuerzo último del material (σ_{ut}), en el caso de los dos microconstituyentes y su vez la carga alcanza el valor máximo de esfuerzo, se presenta falla por fluencia del material en las regiones entre los intervalos de 20 μ m a 30 μ m para la serie 0,5N-0,1 μ (Real), con valores superiores a 1,7 GPa

Para el sustrato ideal (0,5N-0,1 μ i), los esfuerzos no superan la región de fluencia de los microconstituyentes y sus perturbaciones no presentan oscilaciones significativas como para el caso anterior correspondiente al sustrato real, por tal razón, no se evidencia fallas en el material por fluencia en dicho modelo (ver figura 5-4-1-1).



Figura 5-4-1-1: Efecto de la microestructura, Esfuerzo de Von Mises vs Distancia



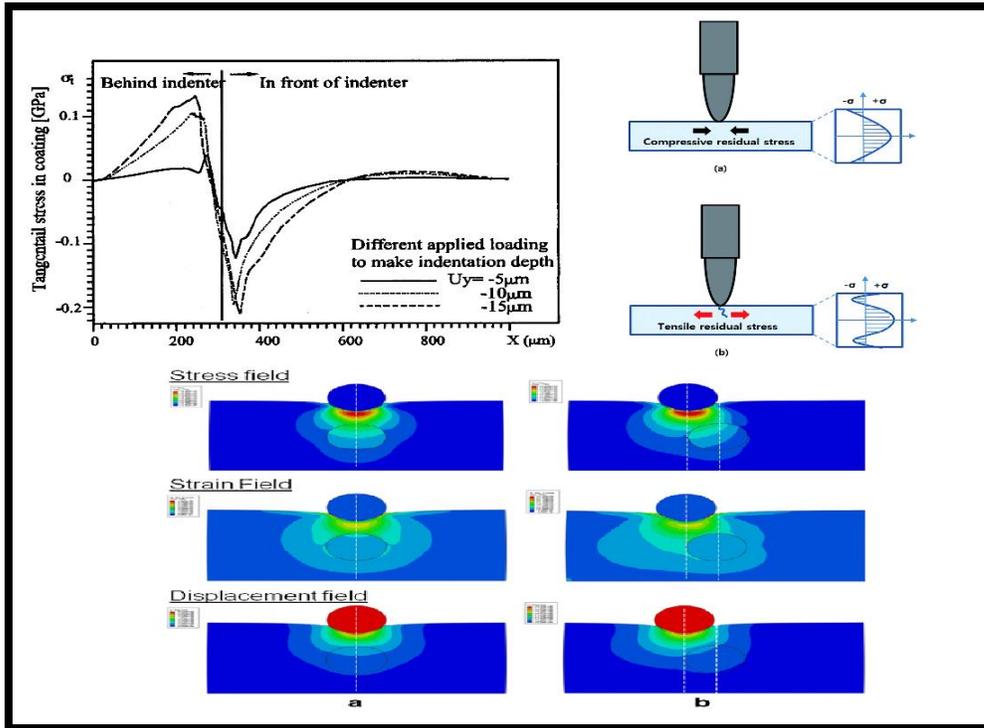
Fuente: Propia

No obstante, si el ensayo de nano rayado se caracteriza por tener una carga progresiva durante el recorrido, la fuerza que se experimenta al comenzar la prueba, es mínima, que solo se crean indentaciones en la microestructura de la Martensita (huella), con esfuerzos próximos a cero a una distancia de $1,7\mu\text{m}$ como se evidencia en la figura 5-4-1-3 con la manifestación del primer pico de deformación plástica equivalente [49], mientras se crea un surco con esfuerzo de baja magnitud, a consecuencia de las propiedades mecánicas, las cuales son menores en el caso de la Martensita comparadas a las presentes en la Bainita superior. A continuación, el indentador recorre la superficie del grano hasta llegar a su frontera, y mientras el indentador se aleja de la huella, su esfuerzo sigue incrementando como consecuencia de la carga progresiva y la disminución del área transversal que sirve de soporte, hasta el punto en donde se evidencia la aparición de la primera perturbación durante el contacto del grano adyacente. Si la región fronteriza tiene como microconstituyente un grano de Bainita superior, su perturbación oscilará con mayor proporción en comparación a una región con grano de Martensita, generando a su vez concentradores de esfuerzos más significativos, puesto que una de las dos microestructuras se está oponiendo con mayor resistencia a la carga normal que intenta comprimir a él sustrato en la parte frontal por parte del indentador, para luego tensarlo en la parte trasera por la componente tangencial, cuando esta última continúa en aumento [50].

Finalmente, es de resaltar que una vez terminado el contacto de la partícula (indentador) sobre las regiones del sustrato, se genera un campo de tensiones residuales en las superficies de los granos sobre ciertos puntos del recorrido, a causa de los esfuerzos tensivos y compresivos manifestados durante el ensayo, como se observa en la figura 5-4-1-2.



Figura 5-4-1-2: Concentrador de esfuerzos y tensión residual durante el contacto

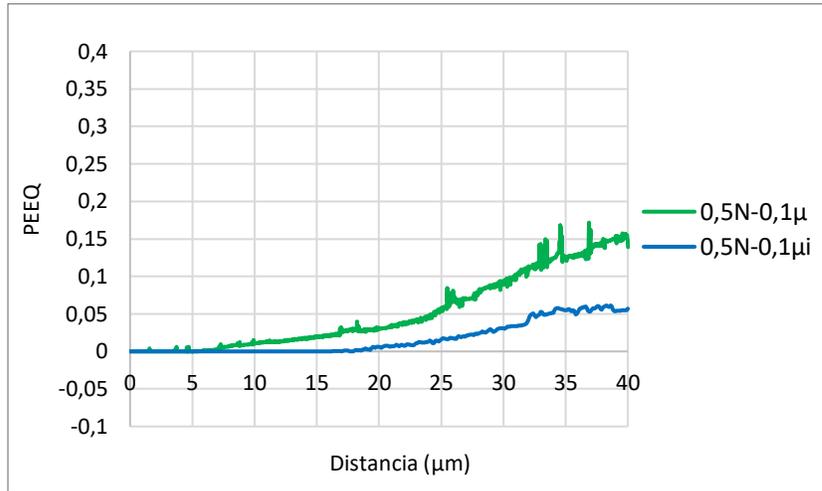


Fuente: Detecting Solid Masses in Phantom Breast Using Mechanical Indentation [51]

Como se ha venido afirmando a lo largo de los subcapítulos en el análisis de resultados, a medida que el esfuerzo crece, la deformación plástica equivalente también lo hace de forma simultánea, para los dos modelos de sustrato (real e ideal). Sin embargo para este caso, se presenta una diferencia significativa, ya que, para el primer sustrato (Real), al superar el límite de fluencia en el intervalo que va desde $20\mu\text{m}$ - $30\mu\text{m}$, se presenta un mayor crecimiento de la función, comparado con el gráfico de deformación plástica equivalente del sustrato ideal, esto debido a que una vez se sobre pasa la región de fluencia en el modelo real, el materia no presenta la misma oposición y por ende su deformación equivalente se aumenta de forma significativa en comparación al modelo ideal, como se observa en la figura 5-4-1-3.



Figura 5-4-1-3: Efecto de la microestructura, Deformación plástica equivalente vs Distancia



Fuente: Propia

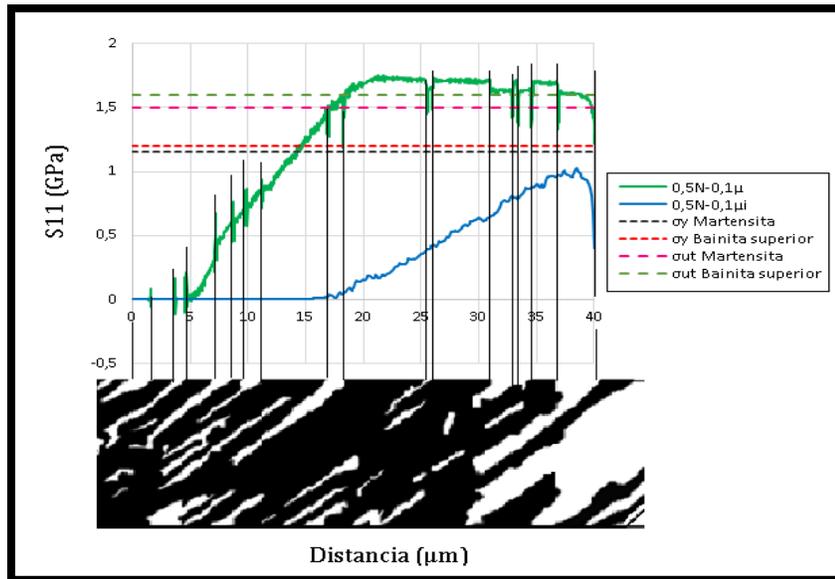
5.4.2 Esfuerzo Normal S11(σ_x)

El esfuerzo S11, es la componente de esfuerzo encargada de aportar mayor carga en la magnitud del esfuerzo de Von mises, primero por su similitud en el comportamiento de las dos figuras (5-4-2-1 y 5-4-1-1), correspondientes a la manifestación de perturbaciones (Concentradores de esfuerzos) y el crecimiento de la función. En segundo lugar, la fuerza tangencial generadora de esfuerzos tensivos creada por la reacción de la carga normal, deberá ser mayor a la componente de la fuerza fricción, con el fin de lograr generar el movimiento inminente del indentador por las diferentes regiones del sustrato (granos) y permitir sobre pasar los contornos fronterizos en los límites de los microconstituyentes, sin dejar a un lado la creación de esfuerzos residuales manifestada al interior del modelo que considera microestructura en el sustrato, encargadas de generar la falla del material en algunas regiones del rayado después del contacto.

El modelo ideal por su parte, no experimenta valores en los esfuerzos por encima de las regiones de los límites de fluencia, y a su vez sus perturbaciones no oscilan de igual manera comparado con el modelo real, por lo que la manifestación de concentradores de esfuerzos existente es baja comparada con el modelo real (0,5N-0,1μ), por tanto, no existe falla por fluencia del material (ver figura 5-4-2-1)



Figura 5-4-2-1: Efecto de la microestructura, S11 vs Distancia



Fuente: Propia

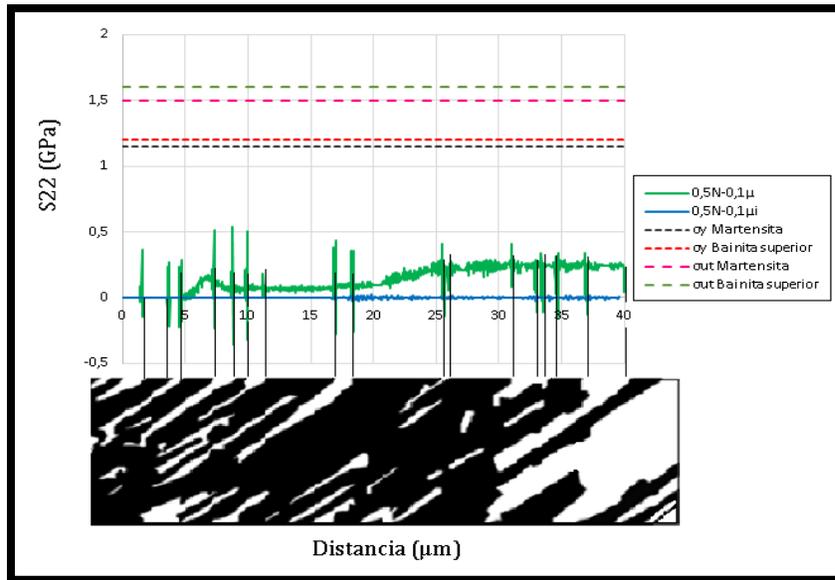
5.4.3 Esfuerzo Normal S22 (σ_y)

Las perturbaciones oscilantes, presentan mayor variación en los esfuerzos de tipo compresivos (S22) a diferencia de los tensivos (S11), lo que indica que cuando el indentador pasa de un micro constituyente a otro por medio de su frontera, lo hace comprimiendo material dentro del surco que ha venido creando a lo largo de su movimiento. Por tal razón, cuando el material presenta alta oposición a fluir (Bainita superior) el esfuerzo de tipo compresivo varía con picos mayores que el esfuerzo de tipo tensivo debido a que el indentador trata de comprimir el material que viene arrastrando previamente desde una región anterior, más el material adyacente que se resiste a fluir, como se observa en la figura 5-4-3-1, en la manifestación de las perturbaciones con mayor oscilación. Para el modelo ideal se presentan magnitudes despreciables en el esfuerzo, lo que indica que para este sustrato prevalecen de forma más significativa los esfuerzos de tipo tensivo que los compresivos durante el recorrido. (ver figura 5-4-2-1).

Es de resaltar que para los esfuerzos S22 correspondientes al modelo real e ideal, ninguno de estos sobrepasa la región de fluencia de los microconstituyentes, por ende, no se tienen esfuerzos cercanos al límite de ruptura. Lo que permite afirmar que estos valores manifestados no influyen de forma significativa en la falla por fluencia de los microconstituyentes.



Figura 5-4-3-1: Efecto de la microestructura, S22 vs Distancia



Fuente: Propia

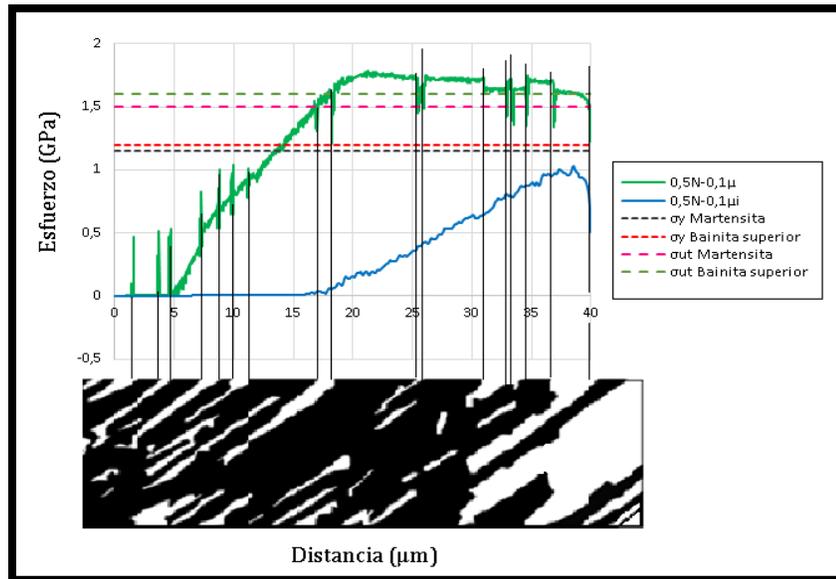
5.4.4 Esfuerzo Máximo principal (σ_{max})

El esfuerzo máximo, se evidencia en los contornos de grano, cuando por cargas combinadas (σ_x , σ_{xy} , σ_y) se manifiestan perturbaciones con mayores oscilaciones entre los límites de los microconstituyentes. Sin embargo, como se explicó anteriormente, son los esfuerzos de tipo tensivos los que predominan en consideración a los compresivos σ_y , puesto que en la mayoría de regiones durante el recorrido no se sobrepasa al valor máximo de resistencia del material por carga compresiva, si no por el contrario se supera por carga tensiva para los microconstituyentes analizados (σ_{ut}). De igual forma, no se presentan valores negativos en representación de los esfuerzos compresivos para el sustrato real (0,5N-0,1 μ), como se observa en la figura 5-4-4-1

El modelo ideal por su parte, al igual que se ha mostrado en las figuras anteriores, no presente perturbaciones con variaciones en sus oscilaciones, y sus esfuerzos son de tipo tensivo, pero sin sobre pasar la región del límite de fluencia establecida para el sustrato sin microestructura.



Figura 5-4-4-1: Efecto de la microestructura, Esfuerzo máximo principal vs Distancia



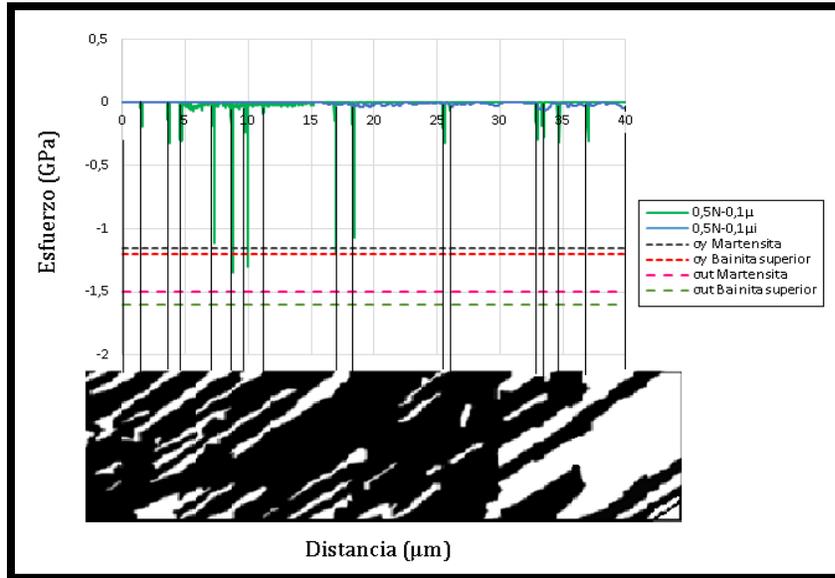
Fuente: Propia

5.4.5 Esfuerzo Mínimo principal (σ_{min})

Para los esfuerzos mínimos principales se tiene un comportamiento contrario al estudiado en el máximo principal, puesto que las componentes más significativas son las que se generan por carga normal compresiva (σ), en los contornos de grano de los microconstituyentes presentes. Sin embargo, su valor de esfuerzo máximo con signo negativo no supera al valor máximo principal (ver Figura 5-4-4-1). dentro de ninguna región del nano rayado. Los valores cuantitativos que toma el sustrato ideal son despreciables para este caso, debido a que a sus valores no muestran oscilaciones con magnitudes mayores comparadas con las del sustrato real, como se observa en la figura 5-4-5-1.



Figura 5-4-5-1: Efecto de la microestructura, Esfuerzo mínimo principal vs Distancia



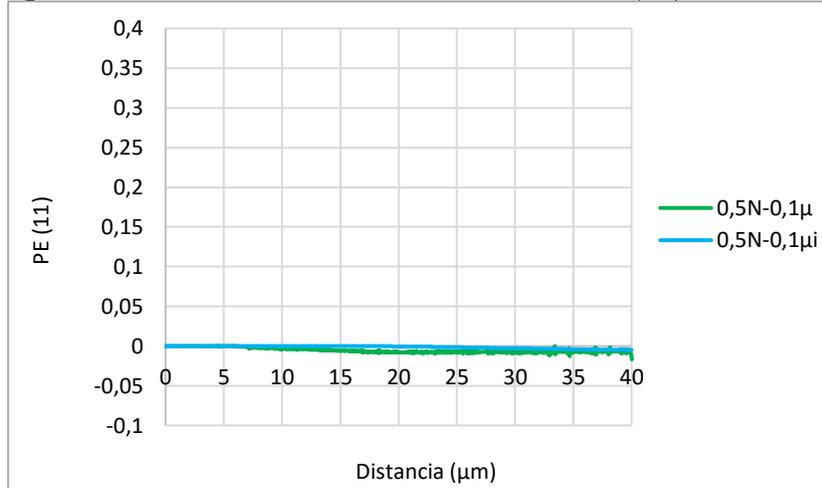
Fuente: Propia

5.4.6 Deformación plástica PE 11 en x

Su deformación es de tipo compresiva, con valores casi despreciables (ver figura 5-4-6-1) tanto para el sustrato con malla real como para el ideal, esto ocurre debido a que el elemento que se selecciona en el modelo de la malla (CPS8), citado en la sección 3.5.2 “selección de malla”, presenta una restricción en el movimiento del plano z, únicamente para los esfuerzos, sin tener en cuenta sus deformaciones. por tal razón, el esfuerzo por compresión (σ_y) genera deformación plástica al igual que la componente del esfuerzo en z (σ_z), creando como momento resultante la deformación plástica por esfuerzos normales de tipo compresivo en el eje x, representado como PE11, con valores casi despreciables puesto que la deformación en z es mínima a causa de la restricción en su esfuerzo



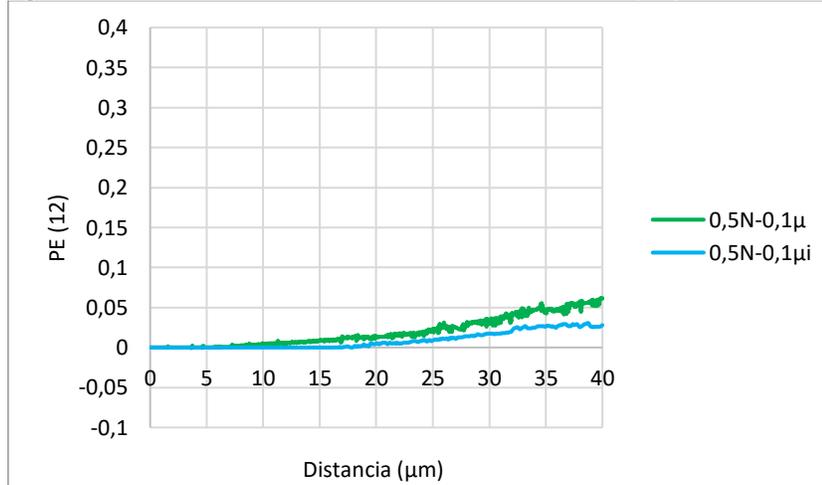
Figura 5-4-6-1: Efecto de la microestructura, PE (11) vs Distancia



Fuente: Propia

La deformación plástica encargada de representar los esfuerzos de tipo tensivos y compresivos es la correspondiente a la deformación plástica por cortante generada por un carga normal y tangencial, donde esta última es la que más aporta en la generación de la falla por cortante a medida que se incrementa la carga, al superar la región de fluencia de los microconstituyentes en la figura 5-4-2-1. De igual manera, a medida que el esfuerzo tensivo y compresivo se hace más grande la deformación plástica sobre el plano 12 (xy) también crece de forma ascendente como se observa en la figura 5-4-6-2

Figura 5-4-6-2: Efecto de la microestructura, PE (12) vs Distancia



Fuente: Propia



Capítulo 6: Conclusiones

- El modelo del sistema creado, está compuesto por 126153 elementos, 154659 nodos, una longitud de rayado de $40\mu\text{m}$, permite simular un rayado para cargas entre 0N - $0,8\text{N}$ coeficientes de fricción de 0 - $0,3$ e indentadores que presentan radios de $1\mu\text{m}$ - $3\mu\text{m}$.
- El aumento de la carga estabiliza el esfuerzo máximo a una menor distancia de recorrido al igual que para el coeficiente de fricción. Sin embargo, al trabajar con el valor mayor de la carga, la distancia para la cual se alcanza el esfuerzo máximo será menor que si se trabaja con el valor máximo del coeficiente de fricción, lo que muestra mayor influencia en la generación de esfuerzos por parte de la carga, que, del coeficiente, para un rango de cargas entre 0N - $0,8\text{N}$, con valores en la escala del coeficiente de fricción que van desde 0 - $0,3$ e indentador con radio de $1\mu\text{m}$ - $3\mu\text{m}$
- Al aumentar el coeficiente de fricción y mantener la carga normal constante, aumenta la fuerza de fricción, lo cual origina mayor oposición del material “sustrato”, obligando que se incremente de forma más rápida la carga normal progresiva, y se alcance su esfuerzo máximo a una menor distancia del rayado, para valores de cargas entre 0N - $0,8\text{N}$, coeficientes de fricción de 0 - $0,3$ e indentadores con radios de $1\mu\text{m}$ - $3\mu\text{m}$. Los valores con coeficientes de fricción superiores a $0,3$ no presentan este comportamiento, ya que sus valores predeterminados en los elementos finitos alcanzan deformaciones superiores a las condiciones recomendados para el elemento como lo sugiere la librería de Abaqus.
- Al incrementar el tamaño del indentador, la distancia de estabilización del esfuerzo aumenta para el modelo que presenta mayor radio, manifestándose perturbaciones con oscilaciones más pequeñas a medida que el radio crece, a lo largo de los $40\mu\text{m}$ de rayado, para valores de cargas entre 0N - $0,8\text{N}$, modelos con indentadores pertenecientes a $1,7\mu\text{m}$ y $3\mu\text{m}$ de radio y coeficientes de fricción con valores entre 0 - $0,3$.
- La microestructura tiene un efecto, por medio de lo observado en las gráficas de Von Mises, comparado con el modelo ideal, debido a que se presentan perturbaciones con oscilaciones más altas, a lo largo del rayado ($0\mu\text{m}$ - $40\mu\text{m}$) durante el recorrido, a causa de los concentradores de esfuerzos generados inicialmente por la indentación de la partícula en las superficie de los granos y posteriormente por las diferencias en las propiedades mecánicas de los microconstituyentes en sus fronteras, donde las regiones que tiene como grano adyacente una región de Bainita superior, muestran los picos más altos de esfuerzos de carácter tensivos a causa del campo de tensión residual generado después del contacto y una oscilación mayor en la deformación plástica equivalente en comparación a las regiones de Martensita. Todo lo nombrado anteriormente, para un modelo de rayado que contempla cargas entre 0N - $0,8\text{N}$, coeficientes de fricción en una escala 0 - $0,3$ e indentadores con radios de $1\mu\text{m}$ - $3\mu\text{m}$.



Bibliografía

- [1] J.Apraiz, Tratamiento termico de los aceros, Madrid: S.L.CIE, 2002.
- [2] A.Valencia, Tecnología del tratamiento termico de los metales, Medellin: U.Antioquia, 2009.
- [3] A. international, «Método de prueba estándar para la fuerza de adhesión y modos de fallo mecánico de los recubrimientos cerámicos por la prueba de rayado de un solo punto cuantitativo 1,» ASTM C1624, USA, 2010.
- [4] R. N.Randall, «Nanoscratch tester for thin film mechanical properties characterization,» *Optical Society of America, American Institute of Physics, American Institute of Physics*, vol. II, nº 7, pp. 2796-2799, 2000.
- [5] R. A.Reid, «Modelling Microestructure with OOF2,» *International Journal of Materials and Product Technology*, vol. 35, nº 3-4, pp. 361-373, 2009.
- [6] N. i. a. a. o. t. U. C. Department., « Finite Element Analysis of Microstructures,» National institute of standards and technology, 07 11 2019. [En línea]. Available: <https://www.ctcms.nist.gov/oof/oof2/>. [Último acceso: 18 01 2020].
- [7] S.Helwany, Applied soil mechanics with ABAQUS applications, New Jersey: John wiley and Sons,Inc, 2007.
- [8] E. D. M. M.Woldman, «A Finite Element Approach to Modeling Abrasive Wear Modes,» *Tribology transactions*, vol. 60, nº 4, pp. 711-718, 2017.
- [9] K. K.Lee, «Scratch tip size effect and change of friction coefficient in nano / micro scratch test using XFEM,» *Tribology international*, vol. 120, pp. 398-410, 2018.
- [10] A. B. J.Zhou, «Realistic microestructural RVE- Based simulations of stress -strain behavior of a dual-phase steel having high martensite volume fraction,» *Material Science and Engineering*, vol. 630, pp. 107-115, 2015.
- [11] P. N.Fukumasu, «Numerical analysis of the stresses developed during the sliding of a cylinder over compact graphite iron,» *Wear*, vol. 259, pp. 1400-1407, 2005.
- [12] A. A. M. R. E. R. T. S. K. E. K.Holmberg, «Computational modelling based wear resistance analysis of thick composite coating,» *Tribology international*, vol. 72, pp. 13-30, 2014.
- [13] K. H. H. P. M. M. A.Laukkanen, «Topographical orientation effects on surface stresses influencing on wear in sliding DLC contacts, Part 2: Modelling and simulations,» *Wear*, Vols. %1 de %2388-389, pp. 18-28, 2017.
- [14] H. K.Holmberg, «Friction and wear of coated surfaces - scales, Modelling and simulation of tribomechanism,» *Surface coating technology*, vol. 202, pp. 1034-1049, 2007.
- [15] S.Bull, «Failure mode maps in the thin film scratch adhesion test,» *Tribology international*, vol. 30, pp. 491-498, 1997.



- [16] G. E. Pérez, «Simulación de un sistema tribológico formado por sustrato recubrimiento rugoso usando métodos numéricos,» *Scielo*, vol. 17, nº ISSN 1815-5944, 2014.
- [17] L. E. Pérez, «Simulación de esfuerzos Sxx durante repetidos ciclos de rayado sobre un sistema recubierto,» *Scielo*, vol. 20, nº ISSN 1815-5944, 2017.
- [18] X. Z. J. Zhao, «Effects of Nucleation Site and Morphology of Carbide-Free Bainite on Microstructures and Properties of Bainite/Martensite Multi-phase Steels,» *Materials Science and Engineering*, 2018.
- [19] M. L. Lan, «On the local mechanical properties of isothermally transformed bainite in low carbon steel,» *Materials Science and Engineering*, vol. 742, pp. 442-450, 2019.
- [20] H. R. A. K. W. A. E. O. E. Kenneth Holmberg, «Tribological analysis of TiN and DLC coated contacts by 3D FEM modelling and stress simulation,» *Wear*, vol. 264, nº 10, pp. 877-884, 2008.
- [21] C. Mosquera, «Análisis computacional de esfuerzos en función de la microestructura del acero 1020 sometido a ensayo de rayado,» *Universidad de Ibagué*, vol. 1, nº 1, pp. 50-62, 2018.
- [22] U. t. o. michigan, «ACMAL,» ShareAlike 2.5 License. Attribute to: ACMAL, Michigan Tech, 2014. [En línea]. Available: http://mcf.mtu.edu/acmal/electronmicroscopy/SP_SteelEtching.htm. [Último acceso: 17 03 19].
- [23] K. Bhadeshia, «Bainite in steels,» *Wear*, Londres, 2005.
- [24] E. n. d. I. plata, «Producto de transformación de la austenita a temperatura,» UNLP, Buenos Aires, 2005.
- [25] Gallager, Bainite transformation, England: Science Direct, 2012.
- [26] X. M. S. C. S. R. Xueda Li, «Influence of prior austenite grain size on martensite–austenite constituent and toughness in the heat affected zone of 700 MPa high strength linepipe steel,» *Materials Science and Engineering*, vol. 616, nº 5, pp. 141-147, 2014.
- [27] W. Rasband, «ImageJ,» National institute of health, 1997. [En línea]. Available: <https://imagej.net/ImageJ1>. [Último acceso: 17 03 19].
- [28] A. Paar, «Mechanical surface characterization,» Gmbh, Australia, 2018.
- [29] A. s. f. t. a. materials, «ASTM international,» 2015. [En línea]. Available: <https://www.astm.org/Standards/D7187.htm>. [Último acceso: 17 03 19].
- [30] P. N. L. K. L. M. Constantinou, «Enhanced Nanoscratch Resistance: Hybrid PECVD/PVD System and Microstructural Characteristics,» *Nanomaterials*, vol. 8, nº 4, pp. 209-226, 2018.
- [31] R. R. V. S. A. Reid, Modelling Microstructures with OOF2, Gaithersburg: Int J. Materials and product technology, 2009.



- [32] D. L.Feng, «Fundamentals and characterizations of scratch resistance,» *Progress in Organic Coatings*, vol. 125, nº 8, pp. 339-347, 2018 <https://www-sciencedirect-com.ezproxy.unibague.edu.co/science/article/pii/S0300944018305617>.
- [33] F. P. J. P. Michael A. Hicks, Cone Penetration Testing 2018: Proceedings of the 4th International, Holanda: CRC PRESS, 2018.
- [34] H. B. K. D. y. P. B. F.Caballero, «Design of novel high strength bainitic steels: Part 1,» *Materials Science and Technology*, vol. 17, nº 5, pp. 512-516, 2013 https://digital.csic.es/bitstream/10261/78350/4/32_MST_01_512.pdf.
- [35] D. G. R. Callister William D, Introducción a la Ciencia e ingeniería de los materiales, Orem: Reverté, 1985.
- [36] S. H. D. H.Lambers, «On the bainitic and martensitic phase transformation behavior and the mechanical,» *Materials Science*, vol. 3, nº 1, pp. 15-27, 2011 https://www.researchgate.net/publication/228597001_On_the_bainitic_and_martensitic_phase_transformation_behavior_and_the_mechanical_properties_of_low_alloy_51CrV4_steel.
- [37] ASTM international, «Standard Test Methods for Rockwell Hardness and Rockwell Superficial Hardness of Metallic Materials,» ASTM international, West Conshohocken, 2003.
- [38] H. Z. Z. M. Y. S. H. F. Y. Zhong, «A study on the effect of double-tip inclined angle on micro-scratching process using smooth particle hydrodynamic method,» *Advances in Mechanical engineering*, vol. 9, nº 8, pp. 1-7, 2017.
- [39] «Researchgate,» Indian institute of technology Madras , 25 05 2016. [En línea]. Available: https://www.researchgate.net/post/Which_is_the_best_simulation_tool_for_nanoindentation_and_or_Scratch_test. [Último acceso: 4 11 2019].
- [40] E. J.Ravagli, «Estudio del grado de endurecimiento y resistencia al desgaste por deslizamiento del acero AISI 1045 endurecido por temple con refrigerante automotor y para mecanizado,» *Revistas UIS ingenierías*, vol. 18, nº 2, pp. 113-120, 2019.
- [41] Y. S. Y. M.Wakuda, «Effect of surface texturing on friction reduction between ceramic and steel materials under lubricated sliding contact,» *Wear*, vol. 254, nº 3, pp. 356-363, 2015.
- [42] E. T. company, «Friction and Friction Coefficients for various Materials,» Engineering ToolBox , 07 04 2004. [En línea]. Available: https://www.engineeringtoolbox.com/friction-coefficients-d_778.html. [Último acceso: 04 11 2019].
- [43] D. C. A. R. Claudio García, «Análisis de diferentes tipos de elementos finitos sometidos a grandes deformaciones elastoplásticas,» *Conference paper, Universidad Católica de Chile* , vol. 1, nº 9, pp. 1-7, 2000 https://www.researchgate.net/publication/318325220_ANALISIS_DE_DIFERENTES_TIPOS_DE_ELEMENTO_S_FINITOS_SOMETIDOS_A_GRANDES_DEFORMACIONES_ELASTOPLASTICAS.
- [44] Y. W. K. C.Srinivasa, «Buckling studies on laminated composite skew plates,» *international journal of computer applications*, vol. 37, nº 1, pp. 1-13, 2012.



- [45] MIT, «Two dimensional solid element library,» 21 Junio 2017. [En línea]. Available: <https://abaqus-docs.mit.edu/2017/English/SIMACAEELMRefMap/simaelm-r-2delem.htm>. [Último acceso: 14 11 2019].
- [46] a. i. m. A. S. u. Michigan state university, «CPFE simulation preprocessing GUIs,» MPI fuer Eisenforschung, 18 01 2013. [En línea]. Available: https://stabix.readthedocs.io/en/latest/preCPFE_gui.html. [Último acceso: 18 01 2020].
- [47] A. T. B.Beake, «Review of recent progress in nano scratch testing,» *Tribology*, vol. 2, nº 7, pp. 87-96, 2013.
- [48] A.AIMotasem y A. G. H. J.Bergstrom, «Atomistic insight on the wear / friction behavior of nanocrystalline ferrite during nanoscratching as revealed by molecular dynamics,» *Tribol Let*, vol. I, nº 12, pp. 65-101, 2017.
- [49] P. D. F. Adam H. Carreon, «Material specific nanoscratch ploughing friction coefficient,» *Tribology International*, vol. I, nº 126, p. 363–375, 2018.
- [50] *. F. Z. B. M. X. R. Y. Z. C. Lia, «Research of material removal and deformation mechanism for single crystal,» *Materials & Design*, vol. I, nº 125, pp. 180-188, 2017.
- [51] S. J. S. O. L. F. K. T. D. S. W. M. R. M. D. K. T. W. L.Sallaway, «Detecting Solid Masses in Phantom Breast Using MechanicalIndentation,» *Experimental mechanics*, vol. 54, nº 10, pp. 935-942, 2014.
- [52] G. J.Pereira, «Scratch test of pearlitic steels influence of normal load and number of passes on the sub superficial layer formation,» *Tribology international*, vol. 128, pp. 337-348, 2018.
- [53] A. L. H. R. W. S. V. Kenneth Holmberg, «A model for stresses, crack generation and fracture toughness calculation in scratched TiN-coated steel surfaces,» *Wear*, vol. 254, nº 3-4, pp. 278-291, 2003.
- [54] T. J. y. T. K.Sugimoto, «Retained Austenite Characteristics and Tensile Properties in a TRIP Type Bainitic Sheet Steel,» *ISIJ international* , vol. 40, nº 9, pp. 902-908, 2000.
- [55] M. i. MatWeb material properties data, «AISI 1045 Steel, Quenched and Tempered to 595 HB,» 01 03 2019. [En línea]. Available: <http://www.matweb.com/search/QuickText.aspx?SearchText=1045>. [Último acceso: 17 01 2020].



Anexo A: Código en Matlab

Figura A-1: Código en Matlab para el microconstituyente de Bainita superior

```
BainitaSuperior.m x Martensita.m x +
1 - E_bainitasuperior = 210000;
2 - e = (0:0.001:0.0057);
3 - esfuerzo_elastico = E_bainitasuperior*e;
4
5 - e2 = (0.0057:0.001:1.035);
6 - n = 0.025;
7 - K = 1365.477;
8 - esfuerzo_plastico = K*(e2.^n);
9
10 - hold on
11
12 - plot (e,esfuerzo_elastico)
13 - plot(e2,esfuerzo_plastico,'magenta')
14 - xlim([0,0.04]);
15
16 - title('Esfuerzo vs Deformación')
17 - xlabel('Deformación unitaria (mm/mm)')
18 - ylabel('Esfuerzo (MPa)')
19 - hold off
20
21 - xlsxwrite('bainitasuperiorp.xlsx',e2,'Hoja1','A2');
22 - xlsxwrite('bainitasuperiorp.xlsx',esfuerzo_plastico,'Hoja1','B2');
23
```

Fuente: Propia

Figura A-2: Código en Matlab para el microconstituyente de Martensita

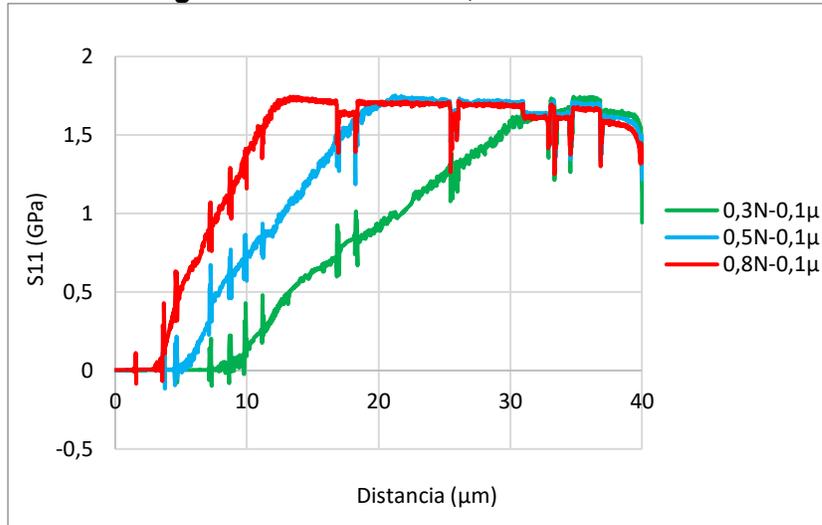
```
BainitaSuperior.m x Martensita.m x +
1 - E_martensita = 200000;
2 - e = (0:0.001:0.0058);
3 - esfuerzo_elastico = E_martensita*e;
4
5 - e2 = (0.0058:0.001:0.040);
6 - n = 0.020;
7 - K = 1274.762;
8 - esfuerzo_plastico = K*(e2.^n);
9
10 - hold on
11
12 - plot (e,esfuerzo_elastico)
13 - plot(e2,esfuerzo_plastico,'magenta')
14 - xlim([0,0.1]);
15 - xlabel('Deformacion unitaria')
16 - ylabel('Esfuerzo')
17 - hold off
18
19 - xlsxwrite('Martensitap.xlsx',e2,'Hoja1','A2');
20 - xlsxwrite('Martensitap.xlsx',esfuerzo_plastico,'Hoja1','B2');
21
22
```

Fuente: Propia



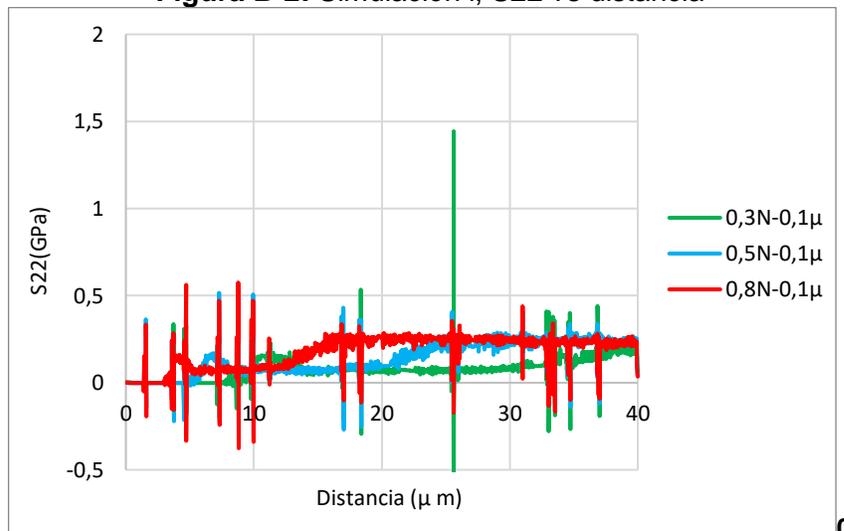
Anexo B: Graficos complementarios para el modelo real

Figura B-1: Simulación I, S11 vs distancia



Fuente: Propia

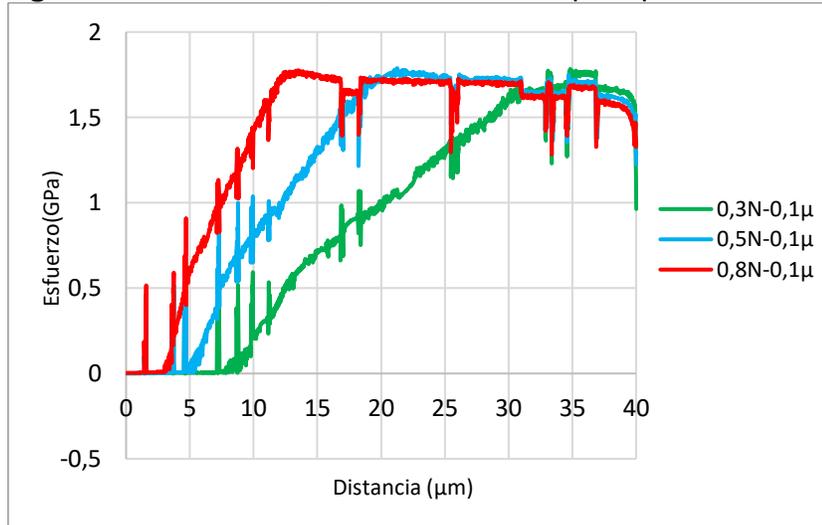
Figura B-2: Simulación I, S22 vs distancia



Fuente: Propia

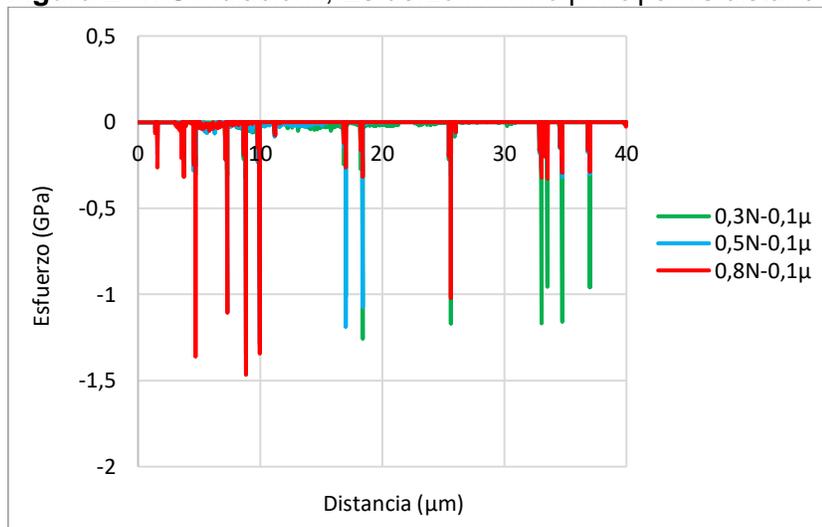


Figura B-3: Simulación I, Esfuerzo máximo principal vs distancia



Fuente: Propia

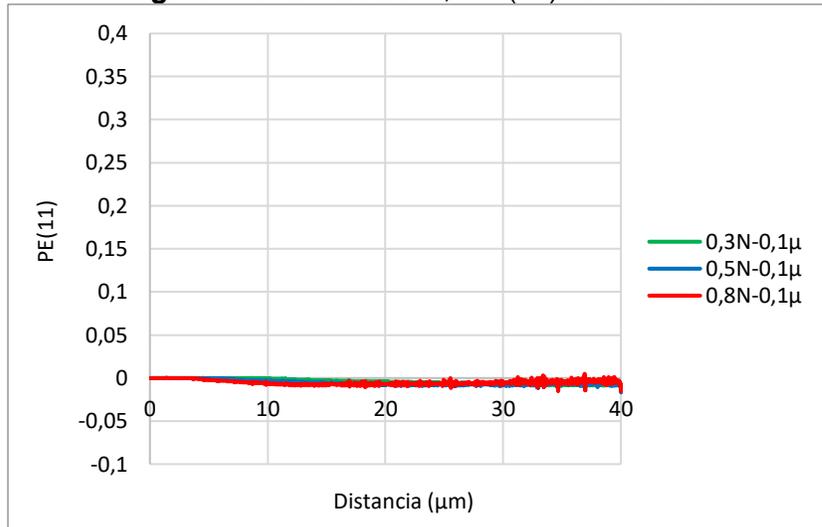
Figura B-4: Simulación I, Esfuerzo mínimo principal vs distancia



Fuente: Propia

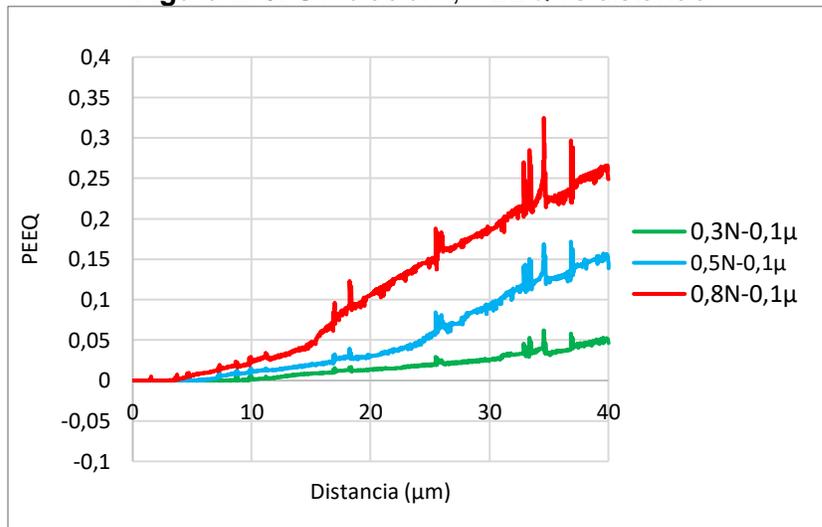


Figura B-5: Simulación I, PE (11) vs distancia



Fuente: Propia

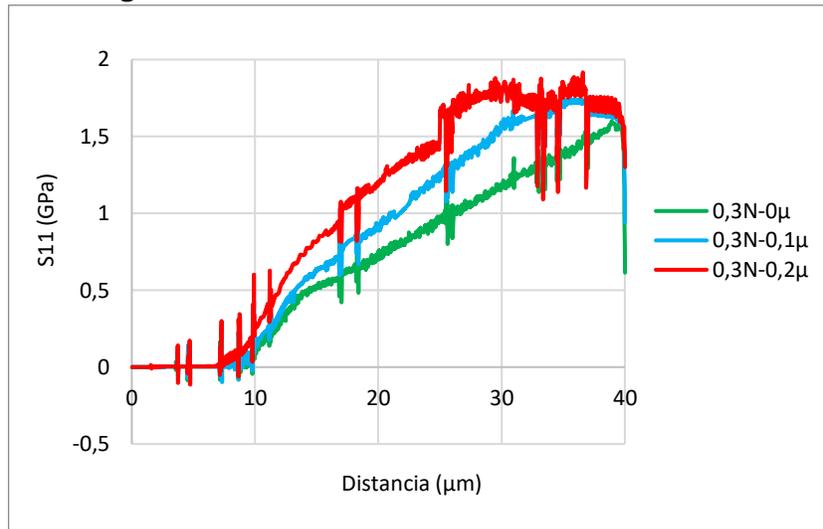
Figura B-6: Simulación I, PEEQ vs distancia



Fuente: Propia

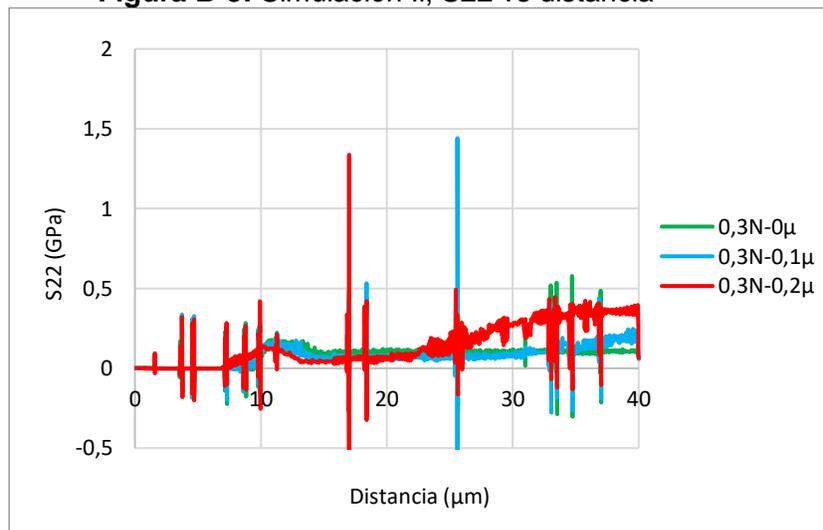


Figura B-7: Simulación II, S11 vs distancia



Fuente: Propia

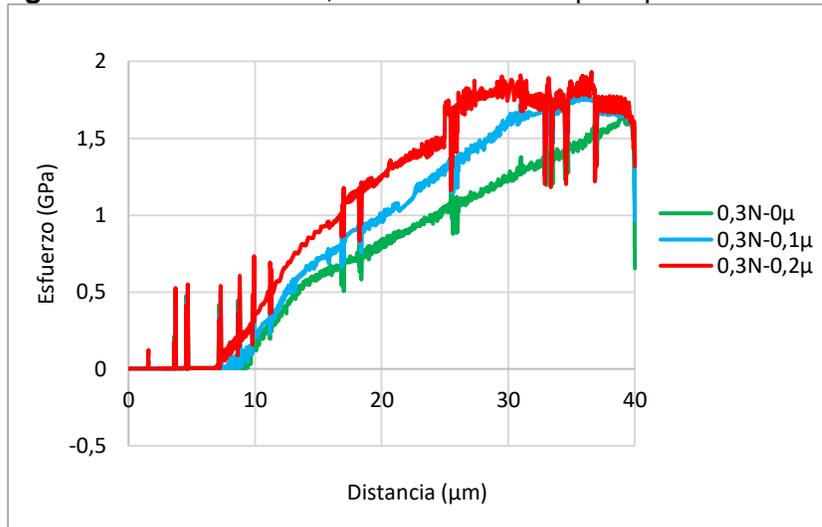
Figura B-8: Simulación II, S22 vs distancia



Fuente: Propia

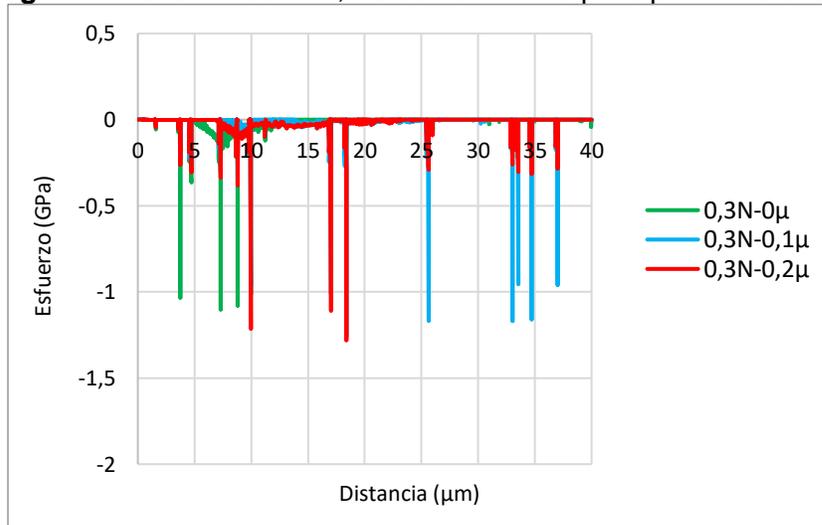


Figura B-9: Simulación II, Esfuerzo máximo principal vs distancia



Fuente: Propia

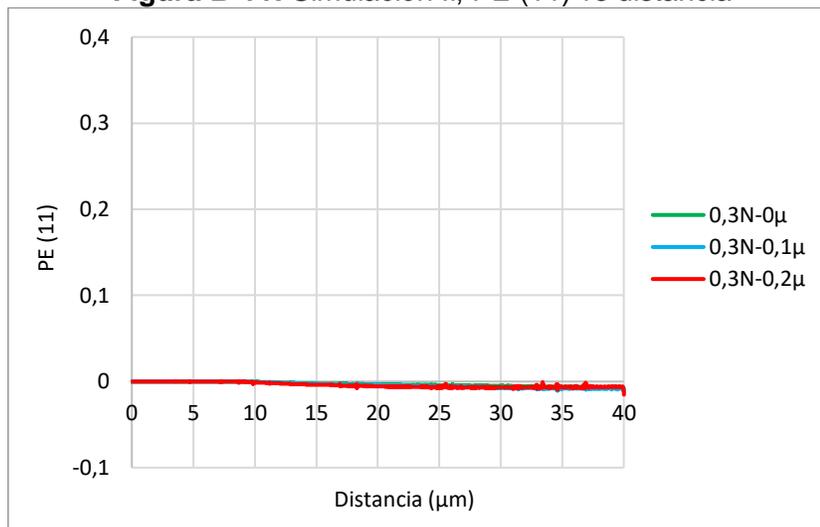
Figura B-10: Simulación II, Esfuerzo mínimo principal vs distancia



Fuente: Propia

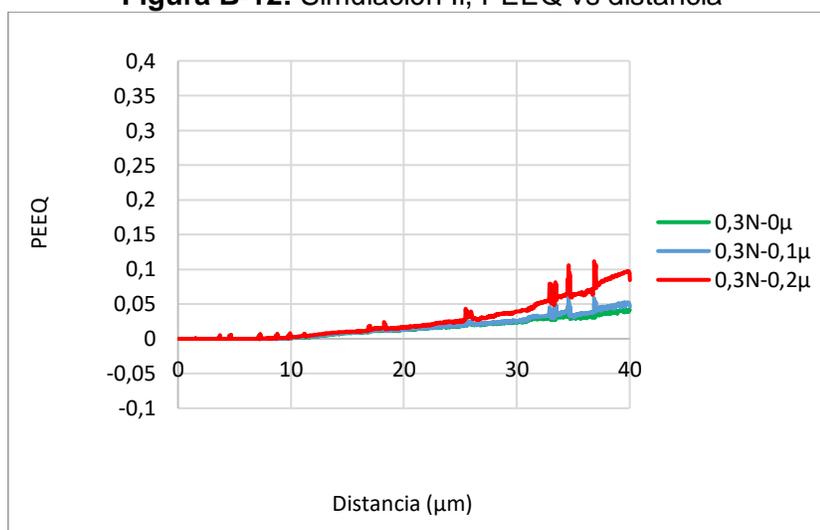


Figura B-11: Simulación II, PE (11) vs distancia



Fuente: Propia

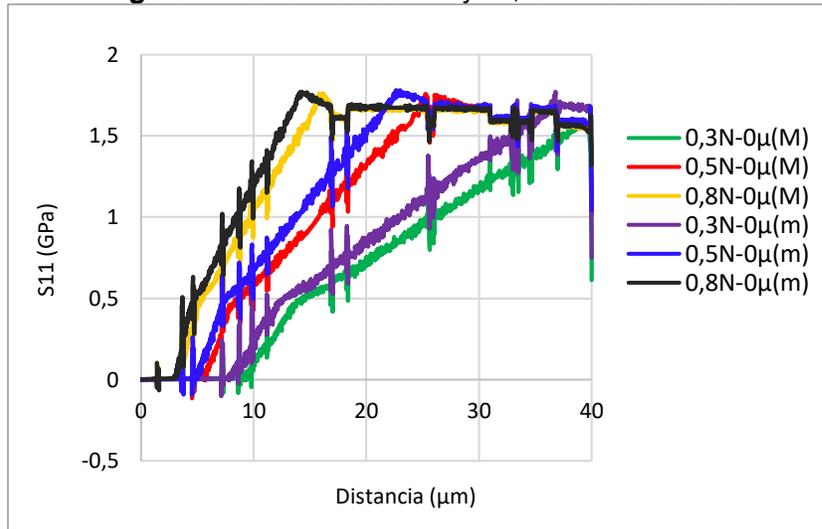
Figura B-12: Simulación II, PEEQ vs distancia



Fuente: Propia

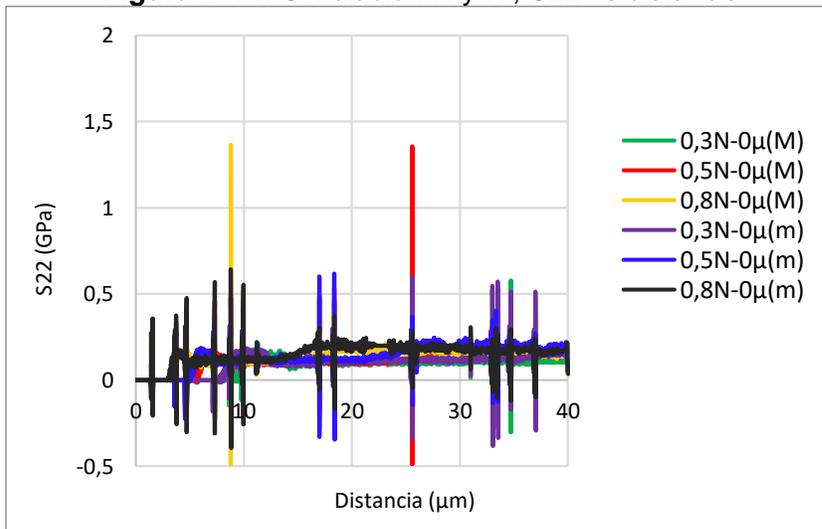


Figura B-13: Simulación III y IV, S11 vs distancia



Fuente: Propia

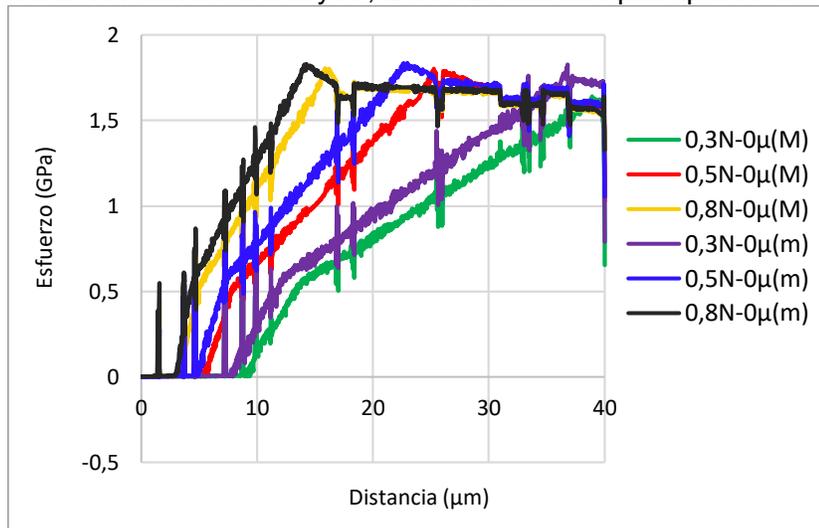
Figura B-14: Simulación III y IV, S22 vs distancia



Fuente: Propia

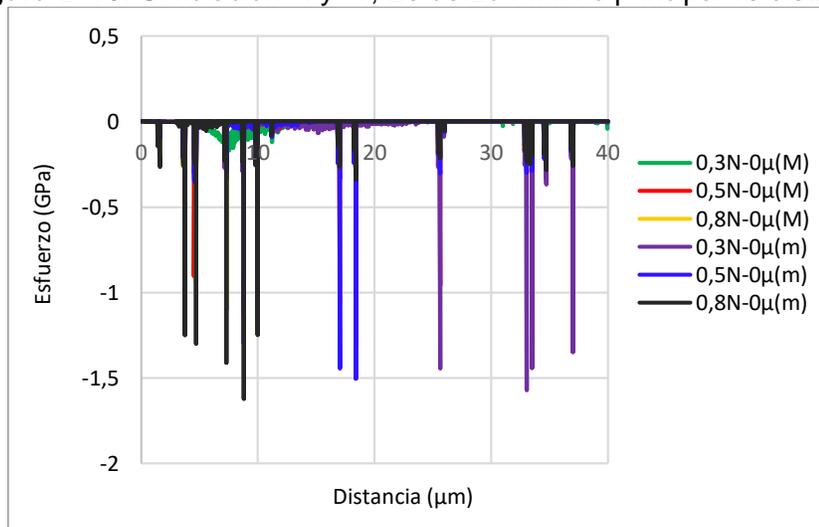


Figura B-15: Simulación III y IV, Esfuerzo máximo principal vs distancia



Fuente: Propia

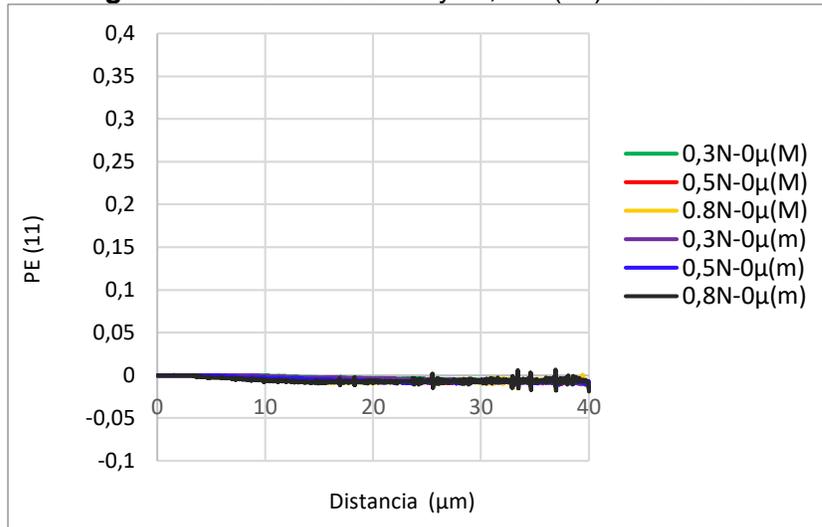
Figura B-16: Simulación III y IV, Esfuerzo mínimo principal vs distancia



Fuente: Propia

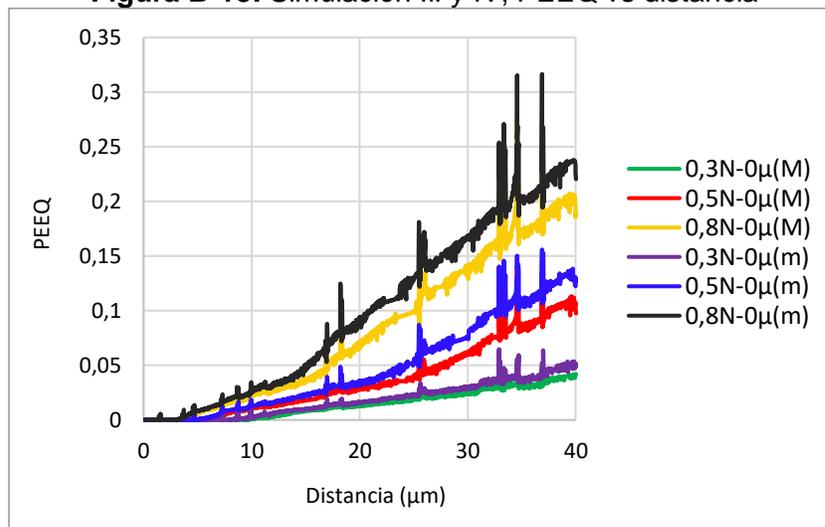


Figura B-17: Simulación III y IV, PE (11) vs distancia



Fuente: Propia

Figura B-18: Simulación III y IV, PEEQ vs distancia



Fuente: Propia



Anexo C: Creación de la malla OOF2

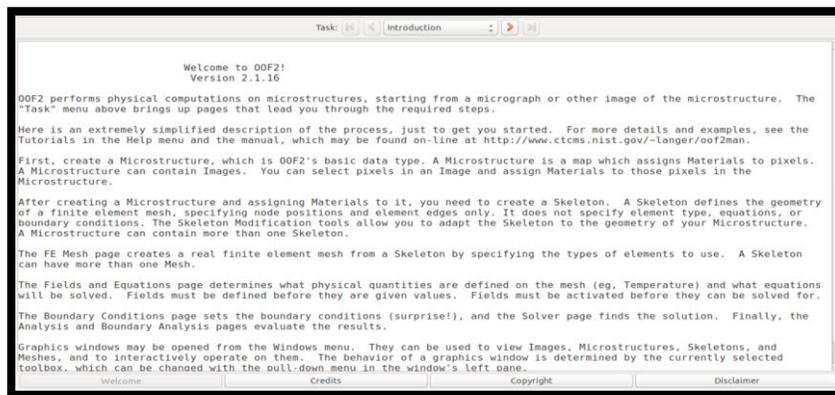
Video tutorial:

https://drive.google.com/file/d/1XKyPJC5X_t0t6XJ9Gpk9Gt4qIDG6hm8j/view

Paso 1: Interface inicial

El paso 1, obedece a la interfaz inicial de oof2, en ella se da un concepto previo de los módulos que conforma el programa y en esencia su función principal. A continuación, se da clic en la pestaña naranja de la parte superior de la imagen, como se observa en la figura 1, para saltar hacia el módulo de microestructura, que permite cargar la imagen tratada previamente en los softwares de ImageJ y adobe Photoshop CS6

Figura C-1: Módulo de introducción

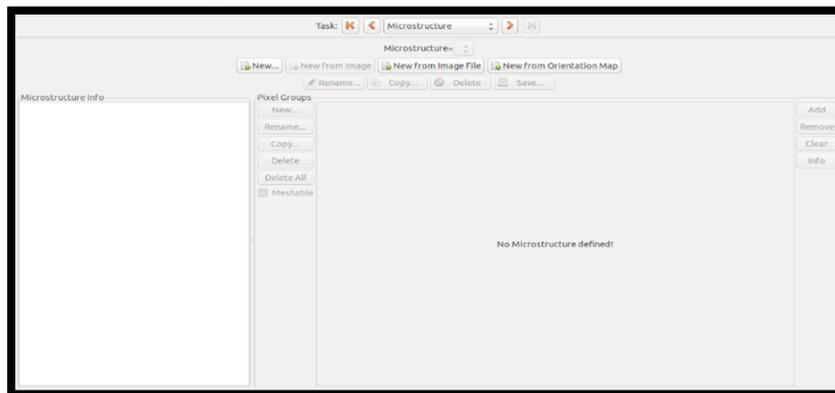


Fuente: Propia

Paso 2: Validación de unidades físicas

En el segundo paso se ingresan los valores físicos de la imagen, para el caso de estudio, se tiene como dimensionamiento 50 micrómetros de largo y 10 micrómetros de ancho, razón por la cual se extrapola a un ensayo de nano rayado (ver figura C-2 y C-3).

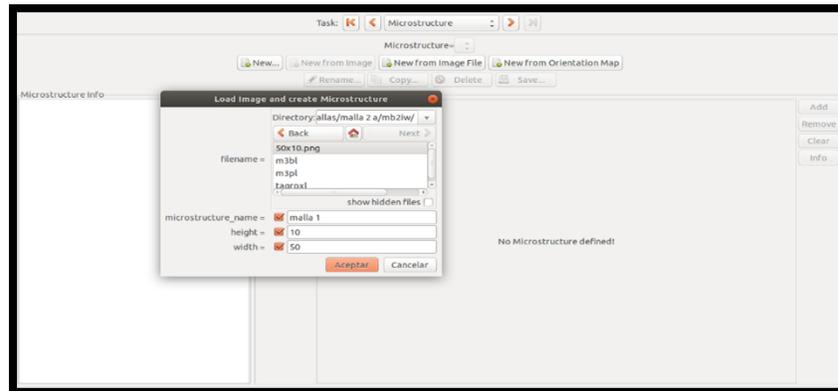
Figura C-1: Módulo de microestructura



Fuente: Propia



Figura C-2: Valores físicos de la imagen

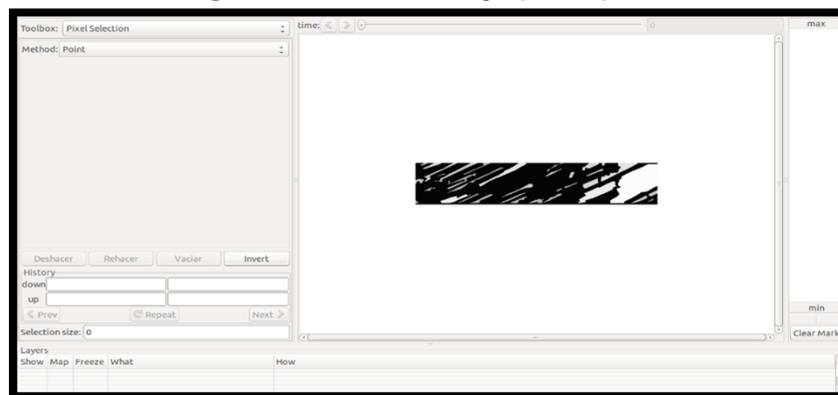


Fuente: Propia

Paso 3: Creación y asignación de grupo pixeles

Para ingresar al paso tres se da clic a la opción “WINDOWS” luego “GRAPHIC”, se selecciona los contornos morfológicos de cada microconstituyente por medio del comando “PIXEL SELECTION” y la opción “BURN” (ver figura C-4 y C-5).

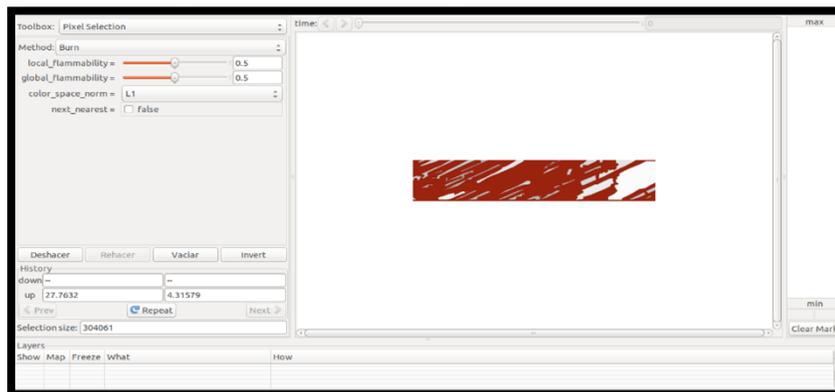
Figura C-3: Selección grupo de pixeles



Fuente: Propia



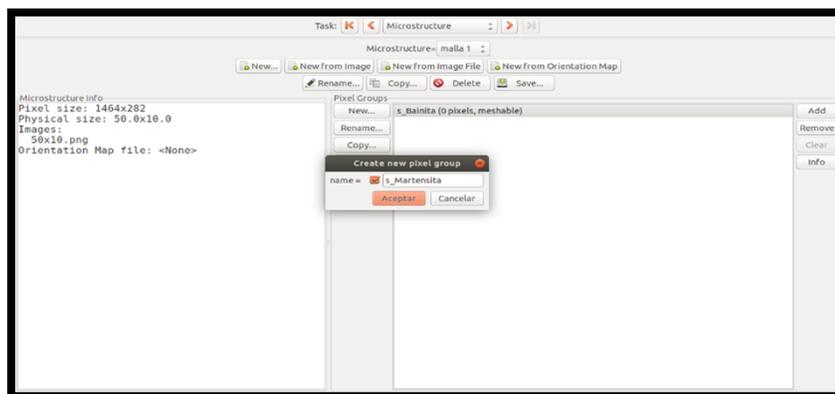
Figura C-4: Selección grupo pixeles Bainita



Fuente: Propia

La selección del grupo de pixeles de los micro constituyentes presentes, por medio de un patrón morfológico obtenido en el tratamiento de imagen (Blancos y negros) debe ser asignada a la creación de un grupo de pixeles (ver figura C-6).

Figura 5: Creación de los objetos representativos de Bainita – Martensita

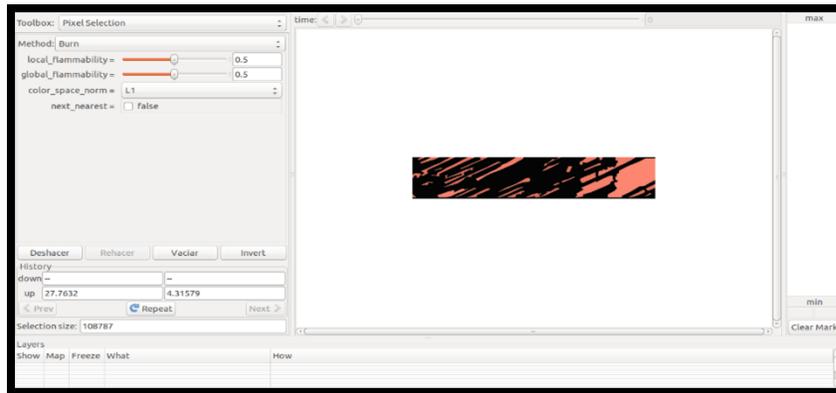


Fuente: Propia

Al igual que en la figura C-5, se procede a seleccionar la microestructura de la Martensita, para luego asignar este grupo de pixeles a la unidad u objeto creado en representación en la selección de pixeles como se nombró anteriormente.



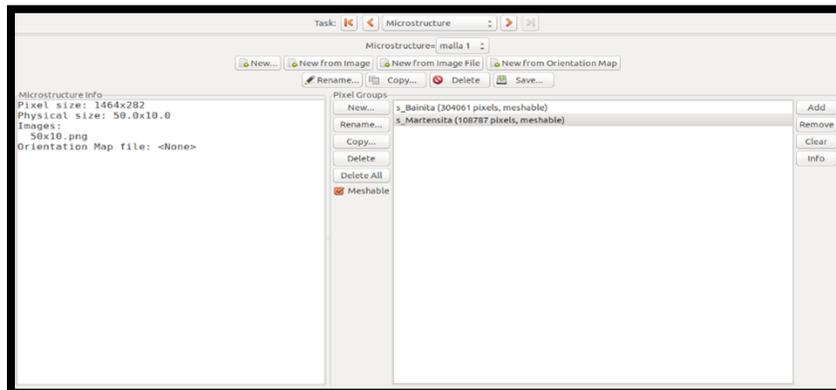
Figura C-7: Selección grupo pixeles Martensita



Fuente: Propia

La figura C-8, muestra el objeto del grupo pixeles creado llamado s_Bainita y s_Martensita, con su respectiva cantidad de pixeles como representación de su fracción volumétrica de los micro constituyentes existentes en la microestructura.

Figura C-8: Asignación grupo pixeles Bainita –Martensita en objeto representativo al grupo de pixeles



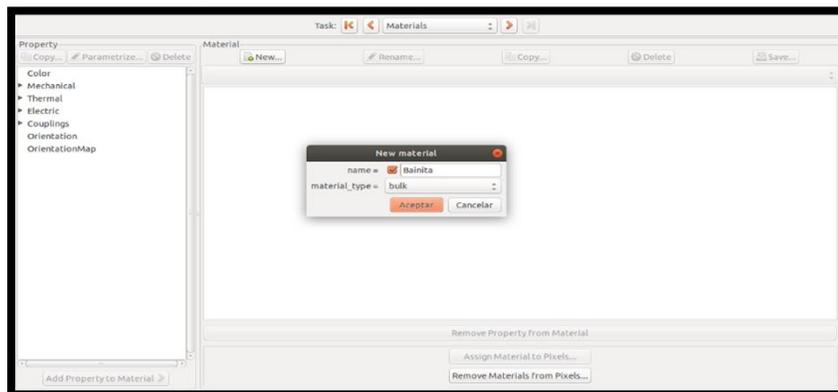
Fuente: Propia

Paso 4: Creación de materiales

La creación del material Bainita, tiene lugar en el módulo de materiales, a través del comando “NEW” bajo el nombre original del microconstituyente (ver figura C-9),



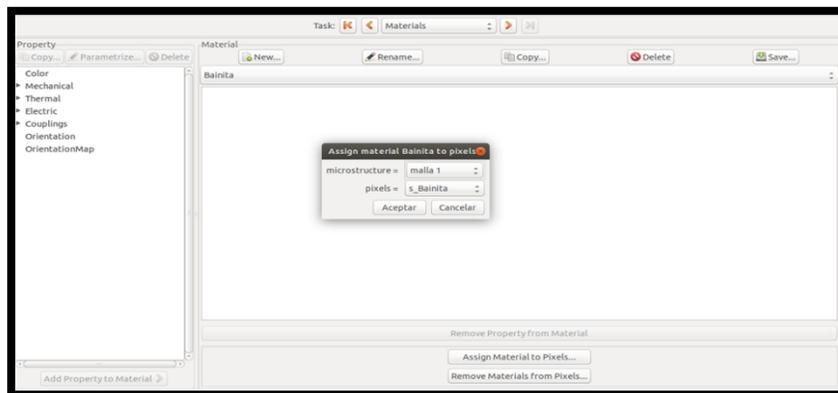
Figura C-9: Creación del material Bainita



Fuente: Propia

Posteriormente, se asigna el objeto creado anteriormente como selección de pixeles Bainita (s_Bainita) al material creado con el nombre de Bainita (Ver figura C-10).

Figura C-10: Asignación grupo de pixeles Bainita en el material Bainita

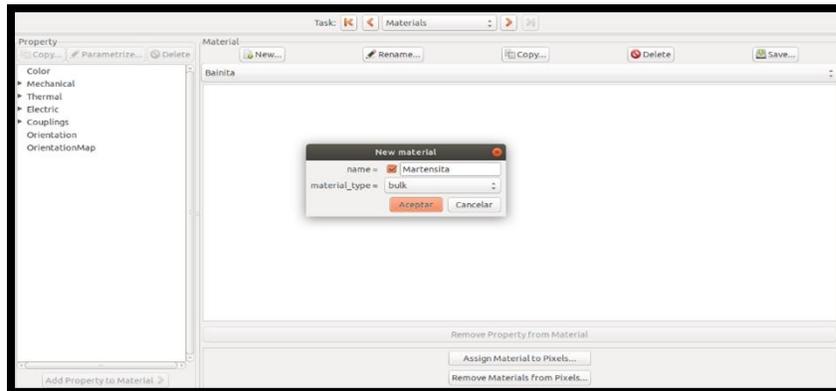


Fuente: Propia

Al igual que en el paso anterior, se procede a realizar la misma acción con la Martensita, como se observa en la figura C-11 y C-12.

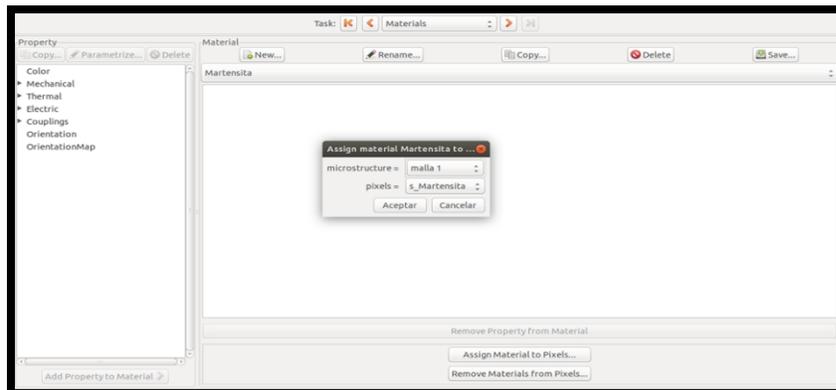


Figura C-11: Creación del material Martensita



Fuente: Propia

Figura C-12: Asignación grupo de pixeles s_Martensita en el material Martensita



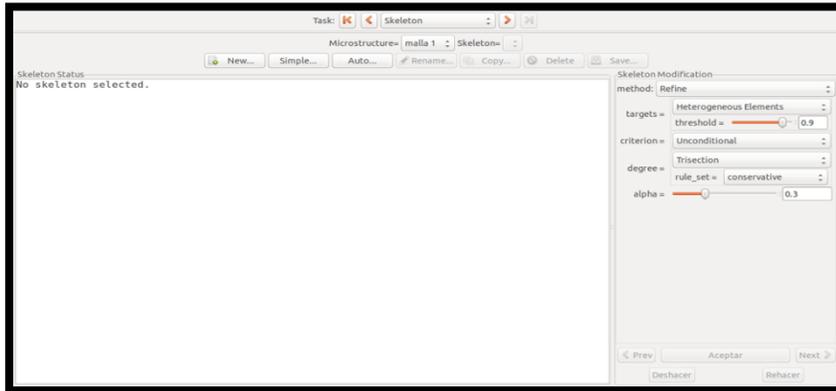
Fuente: Propia

Paso 5: Creación de malla manual

La creación de la malla se realiza en el módulo “SKELETON”, para ello se da clic en “NEW” y se ingresa un primer refinamiento de forma aleatoria a partir de los valores que el creador de la malla tome como criterio para disminuir el costo computacional, y obtener resultados confiables (figura C-13, C-14).

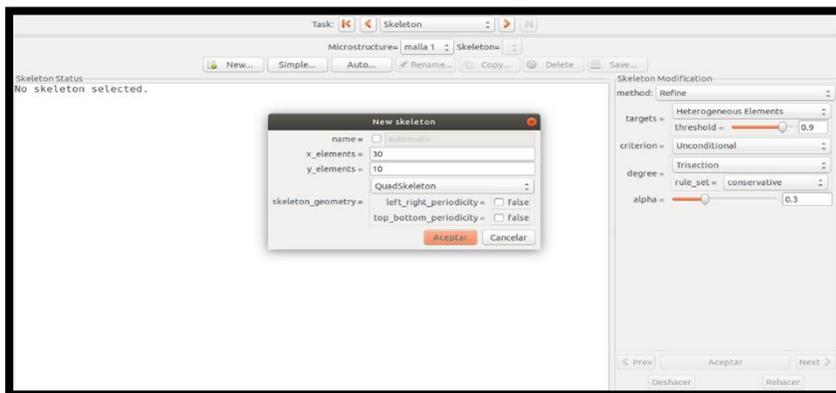


Figura C-13: Modulo para creación de malla



Fuente: Propia

Figura C-14: Creación de malla de forma manual grilla de 30 elementos en x "y" 10 en y

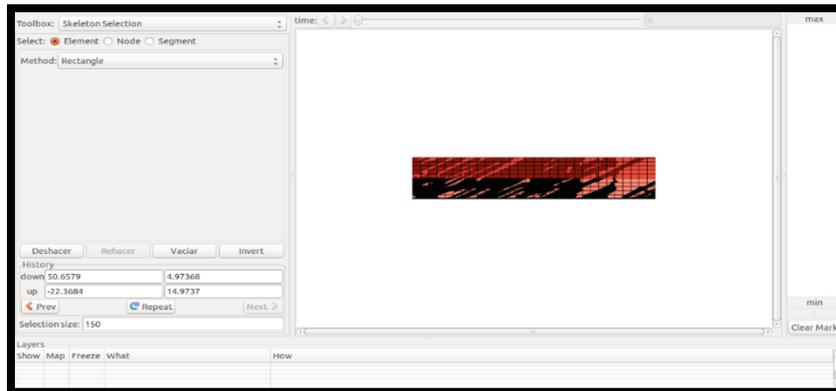


Fuente: Propia

Una vez se crea la primera malla, se procede a realizar el refinamiento de las áreas relevantes (zonas en contacto o afectadas por el indentador), de esta manera existen dos caminos que permiten llevar a cabo este refinamiento. El primero de estos hace hincapié en un sistema de coordenadas, en donde se utiliza cuatro puntos que subrayan regiones rectangulares específicas, o un segundo método que trata únicamente de dar clic en "SKELETON SELECTION" y manualmente crear un rectángulo global donde se subrayen aquellos rectángulos que se requieran refinar. A continuación, se ejecuta dentro del módulo "SKELETON" con el botón "ACEPTAR" la creación de la malla de forma permanente (ver figuras C-15 y C-16).

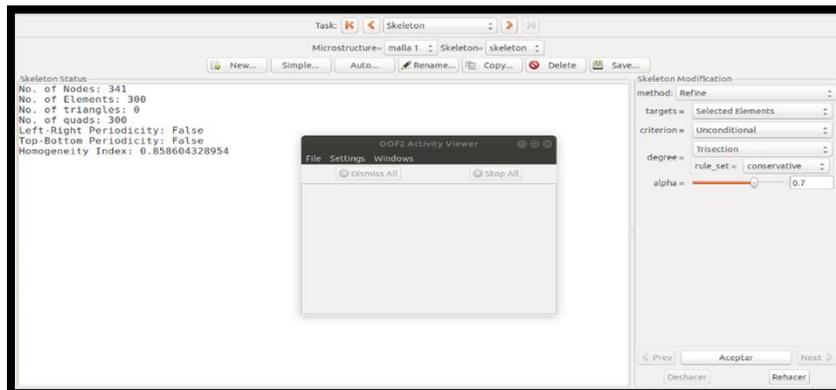


Figura C-15: Selección de coordenadas, Malla inicial



Fuente: Propia

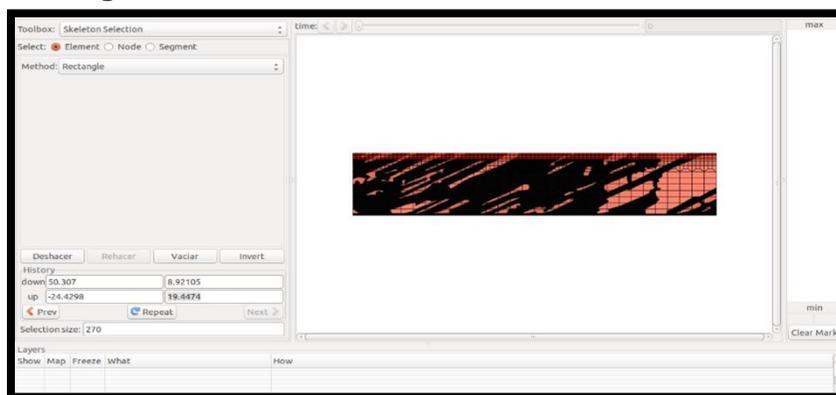
Figura C-16: Ejecución de zona seleccionada malla inicial



Fuente: Propia

De igual forma, se seleccionan cuatro puntos de referencia y se procede a realizar la misma metodología citada en la figura C-15, con el fin de lograr mejor refinamiento en el mallado del sustrato (ver figura C-17), y de esta forma disminuir la creación de elementos distorsionados que generan menor exactitud en la distribución y mapeo de esfuerzos.

Figura C-17: Selección de coordenadas, refinamiento 1

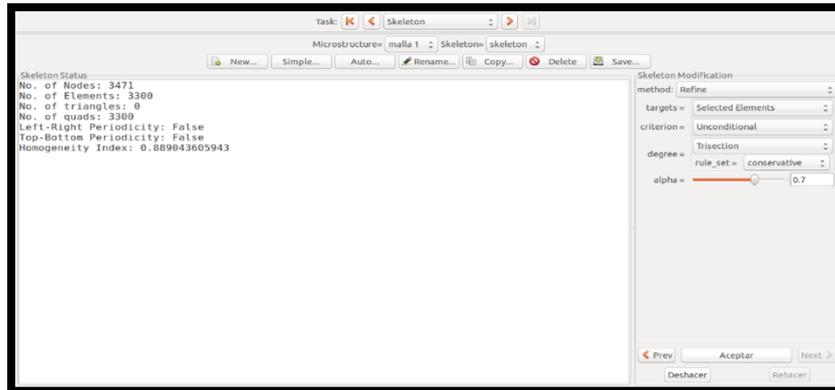




Fuente: Propia

Se ejecuta en una segunda instancia la creación de una malla con un mayor refinamiento en los elementos superficiales del sustrato, como se ilustra en la figura C-18.

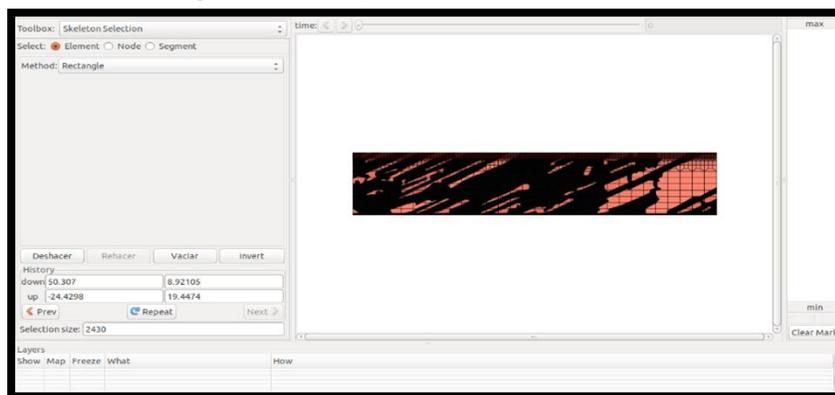
Figura C-18: Ejecución de refinamiento 1



Fuente: Propia

De igual forma, se realiza un refinamiento más, siguiendo las metodologías nombradas en las últimas imágenes anteriores, como se observa en la figura C-19 y C-20.

Figura C-19: Ejecución de refinamiento 2

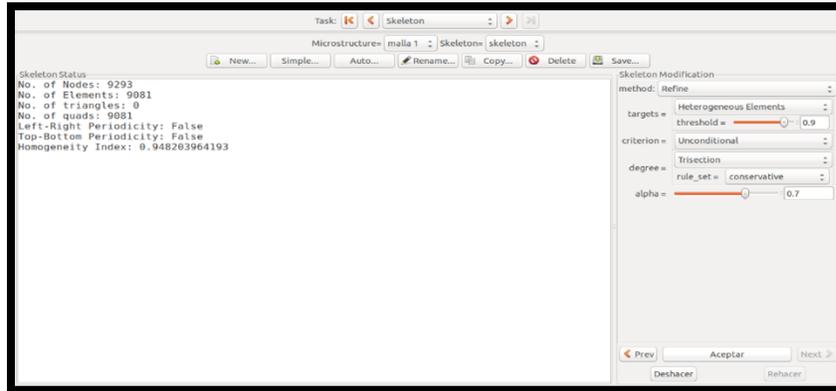


Fuente: Propia

El último paso, se enfoca en el refinamiento de elementos heterogéneos, y busca que las geometrías creadas de forma rectangular terminen de agruparse de tal forma que los contornos de los micro constituyentes estén definidos en su totalidad a partir del criterio de energía promedio, la cual se define como la aceptación de umbral promedio de distorsión en los elementos creados (ver figura C-20).



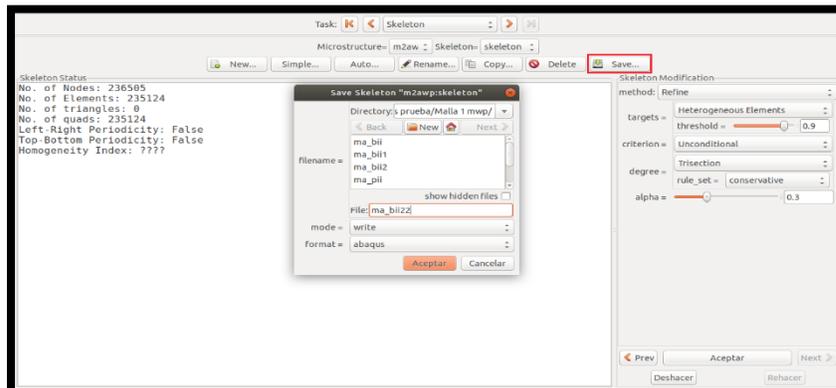
Figura 20: Ejecución en refinamiento de elementos heterogéneos



Fuente: Propia

Para guardar el archivo en formato Abaqus, se da clic en “SAVE”, dentro de módulo skeleton, como se observa en la figura C-20. Cabe resaltar, que una vez guardado el archivo, se debe cambiar el nombre extensión por terminación inp, con el fin de importar este archivo desde la interface de oof2 hacia Abaqus (ver figura C-21).

Figura C-21: Almacenamiento de archivo en formato Abaqus

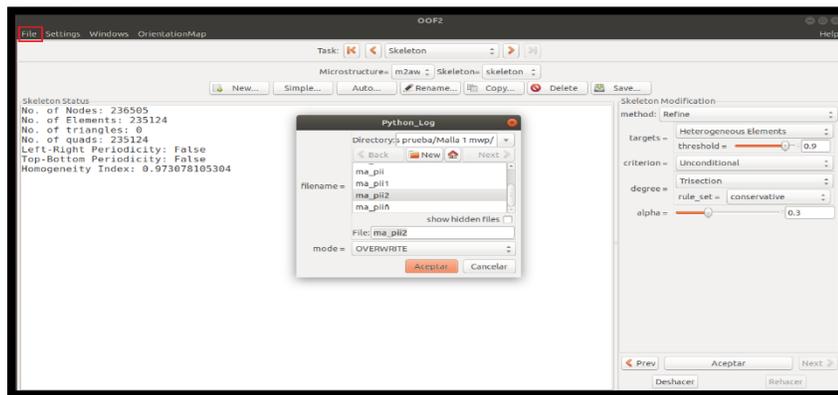


Fuente: Propia

El almacenamiento en formato Python se encarga de cargar el mallado, en la interface de oof2, cuando se requiere modificar ciertas características específicas, en lo que concierne a la creación de elementos. Para la creación del archivo en dicho formato, se da clic en file, seguido de save, para luego dar clic en Python log como se observa en la figura C-22



Figura C-22: Almacenamiento de archivo en formato Python



Fuente: Propia



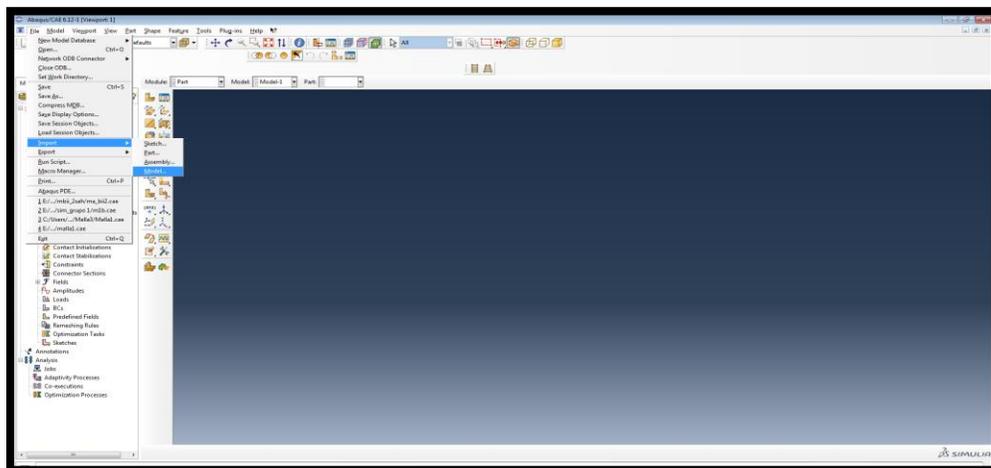
Anexo D: Creación de modelo en Abaqus

Video tutorial: <https://drive.google.com/open?id=19keDtl7JqUHAW3iehA7O5CSLCSim322>

Paso 1: Importación de la malla

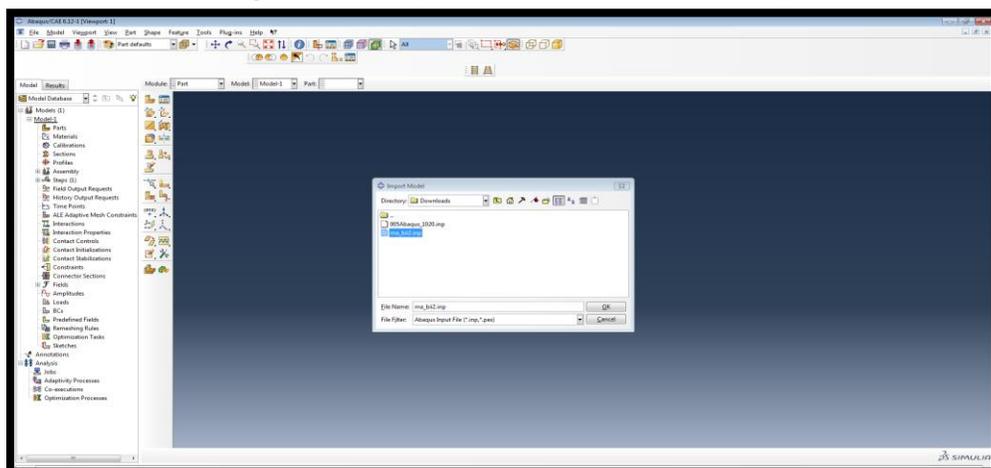
Inicialmente, se procede a importar la malla en el formato .inp que se guarda previamente en oof2, para ello se da clic en file, seguidamente de import, model y se busca el archivo en el disco local, como se observa en las figuras D-1 y D-2.

Figura D-1: Importación de modelo



Fuente: Propia

Figura D-2: Importación modelo, archivo.inp

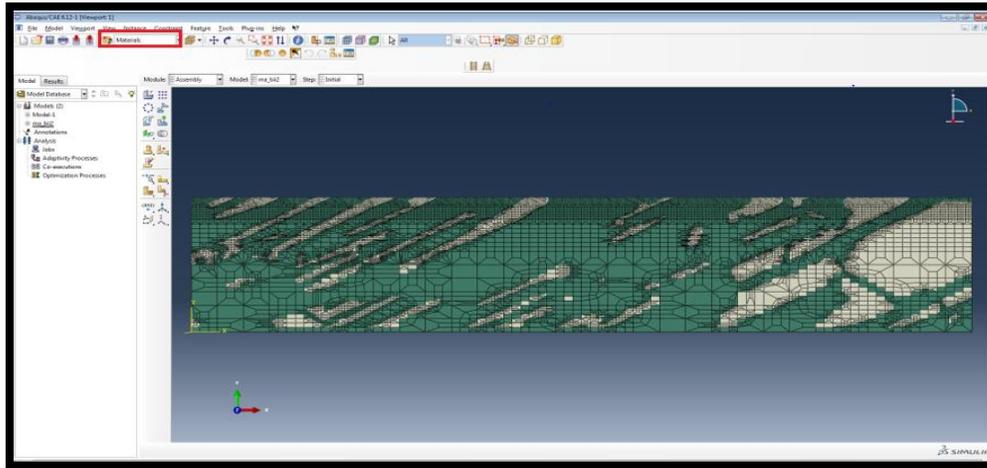


Fuente: Propia



Una vez se importa el modelo en Abaqus, se da clic en materiales, para observar el mallado que presenta cada uno de los microconstituyentes. Para la investigación se tiene que los contornos morfológicos de color verde obedecen a una microestructura de Perlita Fina, mientras que el color blanco representa una zona de Martensita (ver figura D-3)

Figura D-3: Mallado de microestructura



Fuente: Propia

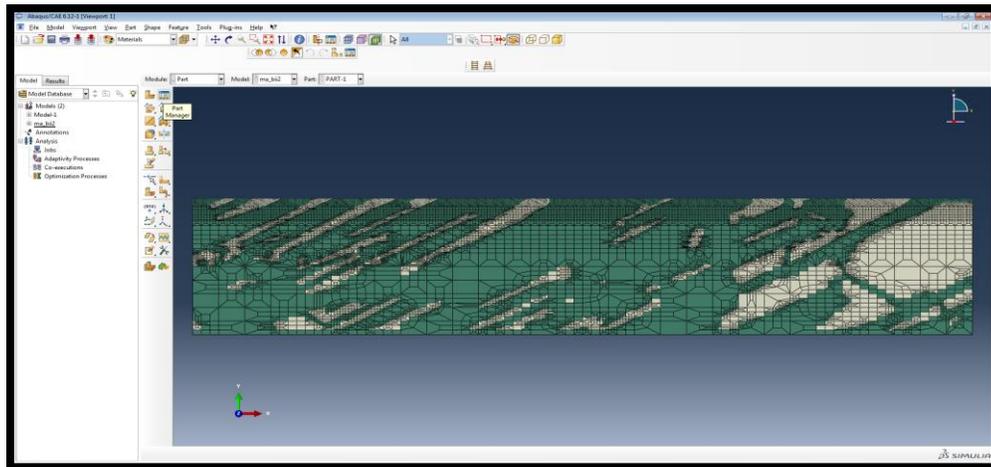
Paso 2: Modulo creación de partes

El módulo part, permite a partir de segmentos, arcos, esferas, circunferencias, entre otros, crear figuras regulares, no regulares en lo que corresponde a piezas en 2D o en su defecto piezas con mayor complejidad como lo son sólidos rígidos con diferentes tolerancias (piezas en 3D).

En la investigación, se crea el indentador de forma semicircular en 2D, para ello se modela como una partícula rígida, en una zona de trabajo establecida o grilla de $(30 \times 30) \mu\text{m}^2$. Una forma practica de crear este indentador, es tratar de establecer puntos coordenados, en donde existan por lo menos uno de estos como referencia y otro que funciones como arco de semicircunferencia. Las coordenadas en la creación de la partícula se llevan a cabo, como se ilustra en las figuras (D-4, D-5).

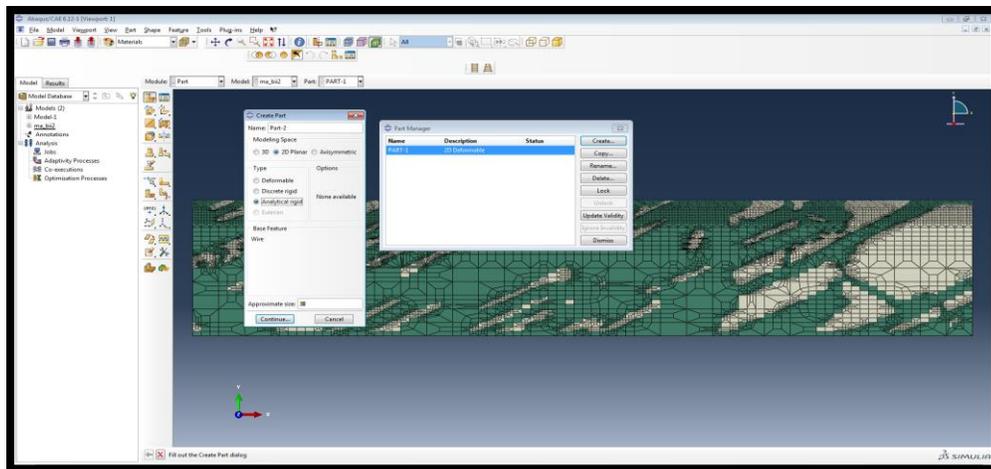


Figura D-4. Administrador de partes



Fuente: Propia

Figura D-5. Parametros de modelamiento indentador

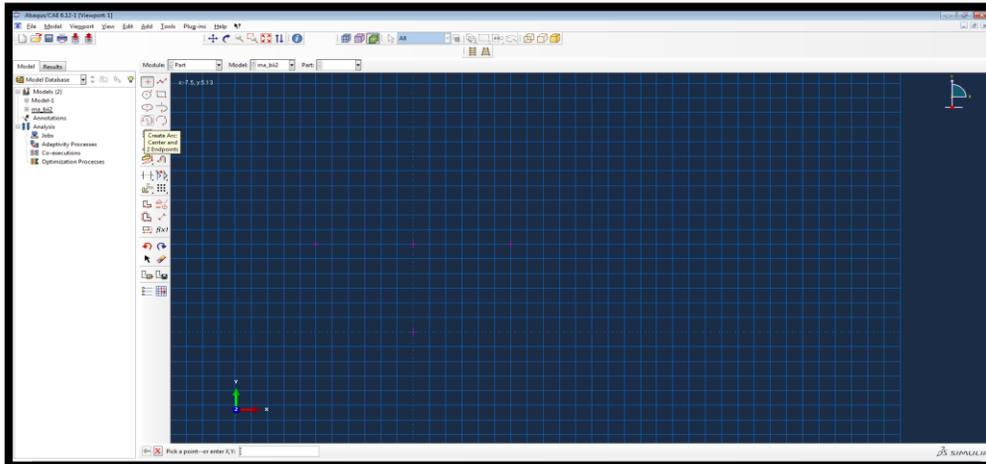


Fuente: Propia

En el espacio de trabajo se ingresan cuatros puntos, para la creación del indentador, los cuales corresponden a $(0,0)$ $(0,3)$ $(3,3)$ $(-3,3)$, para el indentador con ángulo de 60° , como se observa en la figura D-8, por medio del comando de puntos aislados (ver figura D-6) Una vez localizado los puntos de coordenadas, se selecciona el comando creación de un arco a partir de dos puntos, y mediante un clic desde el centro superior, hasta el punto lateral derecho de la coordenada, se forma la mitad de la semicircunferencia. De igual forma, se procede con el punto inferior desde el punto central hasta cerrar la semicircunferencia (ver figura D-7).

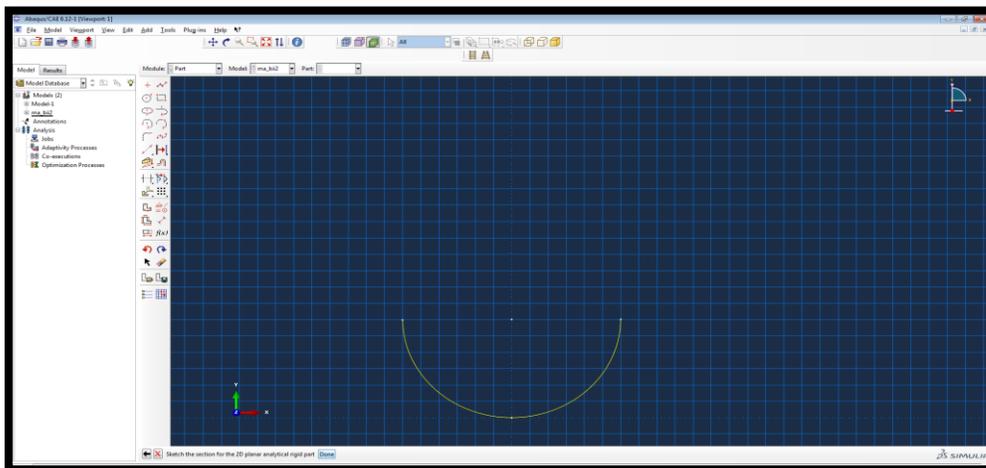


Figura D-6. Puntos de coordenadas



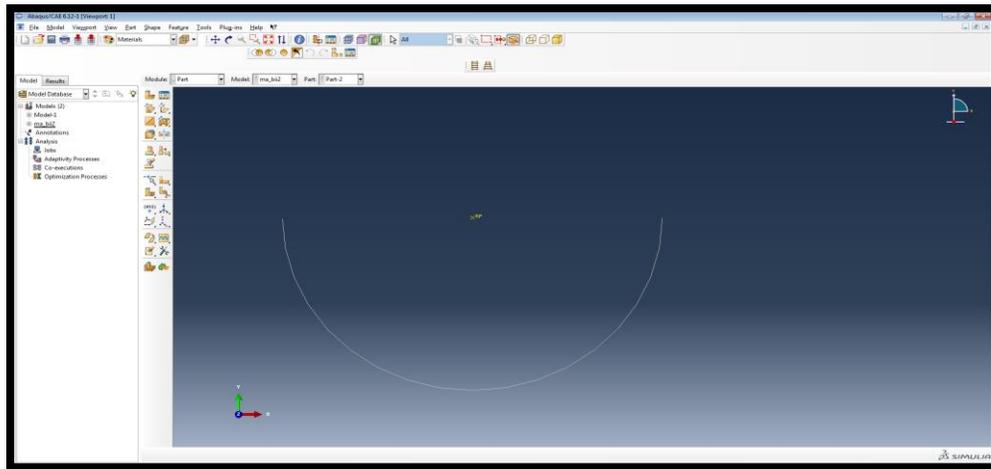
Fuente: Propia

Figura D-7. Indentador semicircular de 60°



Fuente: Propia

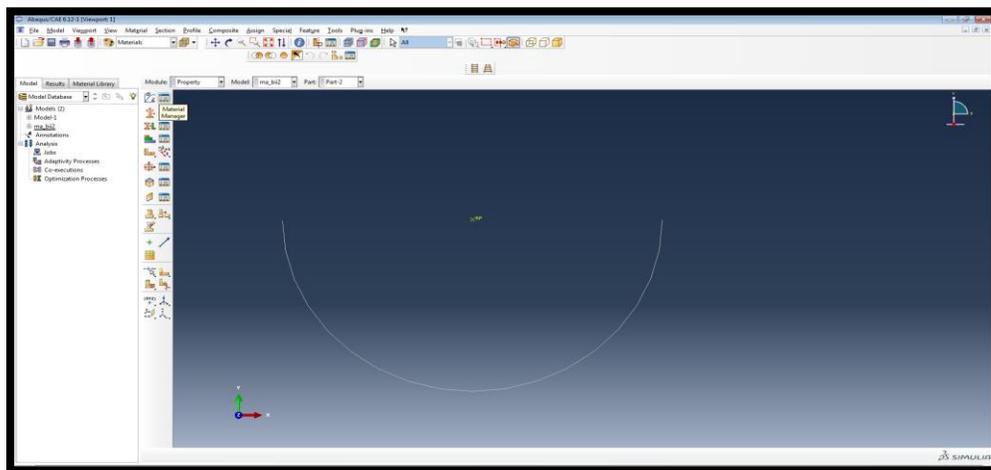
A continuación, se procede a crear el punto de referencia dentro de la geometría del indentador, este punto permite la asignación de magnitudes de fuerza y desplazamiento a lo largo del nano rayado. Para su creación se da clic en “TOOLS” y se selecciona la opción “REFERENCE POINT” y automáticamente la semicircunferencia muestra los distintos puntos que son los posibles candidatos para ser el punto de referencia, como se observa en la figura D-8.

**Figura D-8. Punto de referencia**

Fuente: Propia

El administrador de materiales, permite asignar a el sustrato las propiedades elasto-plasticas de los microconstituyentes presentes, para la zona elastica se requiere unicamente ingresar el modulo de elasticidad y su respectivo modulo de poisson

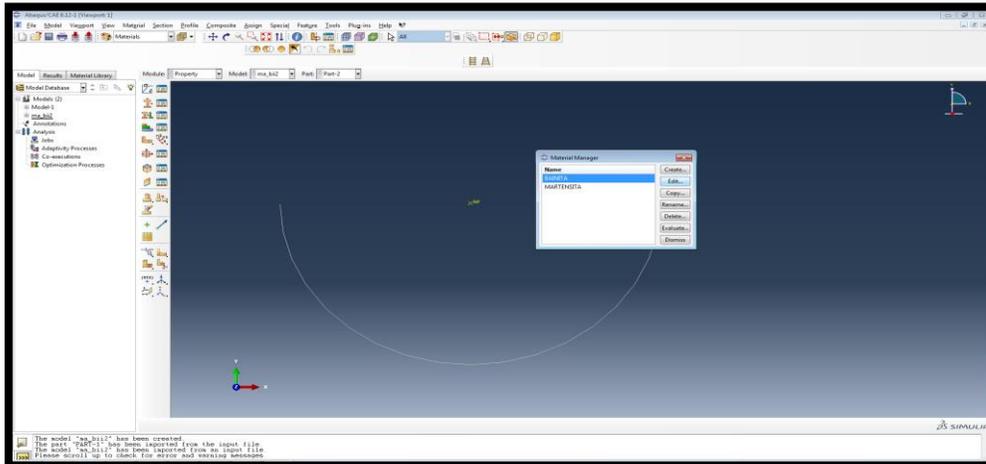
Por otro lado, la region plastica exige mayor tabulacion, puesto que su comportamiento es de tendencia exponencial y comienza desde el limite de fluencia de la zona elastica hasta la resistencia maxima del material de la region plastica.

Figura D-9. Administrador de materiales

Fuente: Propia



Figura D-10. Edición de la microestructura Bainita



Fuente: Propia

Paso 3: Modulo de asignaciones propiedades elasto plasticas y modelo en Matlab

Se declara inicialmente un valor de modulo de elasticidad para la bainita el cual corresponde a 210 GPa, se crea un vector con paso de 0.001 hasta 0.0067 que equivale a la maxima deformacion alcanzada en la zona elastica, calculada con la ecuacion (1). Adicionalmente se crea un vector que ira desde la deformacion unitaria maxima (zona elastica), hasta el esfuerzo ultimo (zona plastica) que soporta el material, a partir de la constante de plasticidad (K).

Figura D-11.Codigo en Matlab Bainita

```
BainitaSuperior.m  Martensita.m  +
1 - E_bainitasuperior = 210000;
2 - e = (0:0.001:0.0057);
3 - esfuerzo_elastico = E_bainitasuperior*e;
4
5 - e2 = (0.0057:0.001:1.035);
6 - n = 0.025;
7 - K = 1365.477;
8 - esfuerzo_plastico = K*(e2.^n);
9
10 - hold on
11
12 - plot (e,esfuerzo_elastico)
13 - plot(e2,esfuerzo_plastico,'magenta')
14 - xlim([0,0.04]);
15
16 - title('Esfuerzo vs Deformación')
17 - xlabel('Deformación unitaria (mm/mm)')
18 - ylabel('Esfuerzo (MPa)')
19 - hold off
20
21 - xlsxwrite('bainitasuperiorp.xlsx',e2,'Hoja1','A2');
22 - xlsxwrite('bainitasuperiorp.xlsx',esfuerzo_plastico,'Hoja1','B2');
23
```

Fuente: Propia

Al igual que para la bainita se procede a realizar el mismo procedimiento para el caso de la martensita como se observa en la figura D-12.



Figura D- 12. Código en MatLab Martensita

```

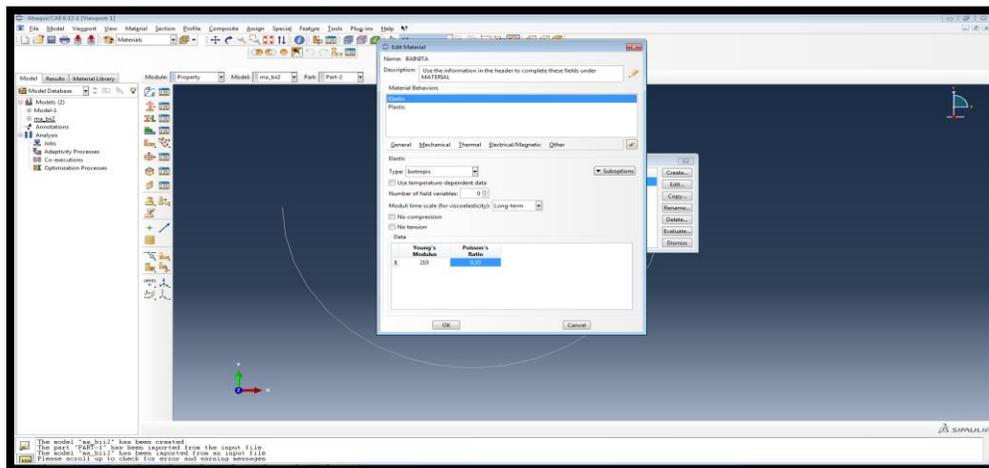
BainitaSuperior.m  Martensita.m  +
1  E_martensita = 200000;
2  e = (0:0.001:0.0058);
3  esfuerzo_elastico = E_martensita*e;
4
5  e2 = (0.0058:0.001:0.040);
6  n = 0.020;
7  K = 1274.762;
8  esfuerzo_plastico = K*(e2.^n);
9
10 hold on
11
12 plot (e,esfuerzo_elastico)
13 plot (e2,esfuerzo_plastico,'magenta')
14 xlim([0,0.1]);
15 xlabel('Deformacion unitaria')
16 ylabel('Esfuerzo')
17 hold off
18
19 xlsxwrite('Martensita.xlsx',e2,'Hoja1','A2');
20 xlsxwrite('Martensita.xlsx',esfuerzo_plastico,'Hoja1','B2');
21
22

```

Fuente: Propia

Una vez realizado el modelo para las dos microestructuras, se ingresan los valores de la tabla 3-3-1 y 3-3-2, y los valores obtenidos por Matlab de las tablas 3-4-1 y 3-5-1, de la región plástica, tanto para la microestructura de Bainita como para la Martensita (ver figura D-13 y D-14).

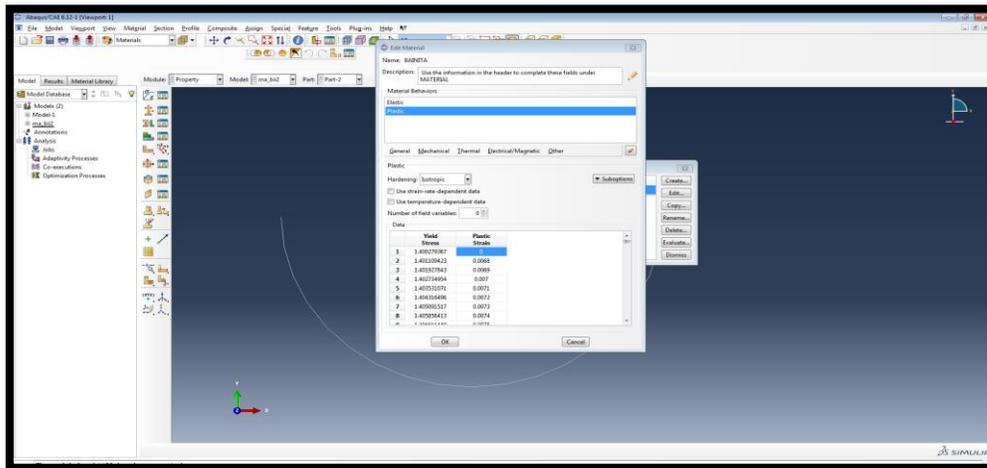
Figura D-13. Asignación de valores microconstituyentes Bainita



Fuente: Propia

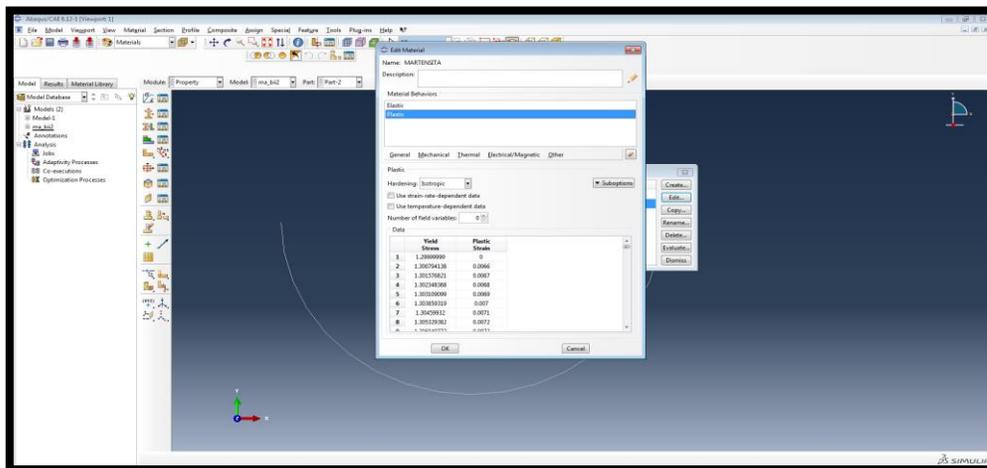


Figura D-14. Asignación de valores microconstituyentes Bainita - zona plastica



Fuente: Propia

Figura D-15. Asignación de valores microconstituyentes Martensita - zona plastica



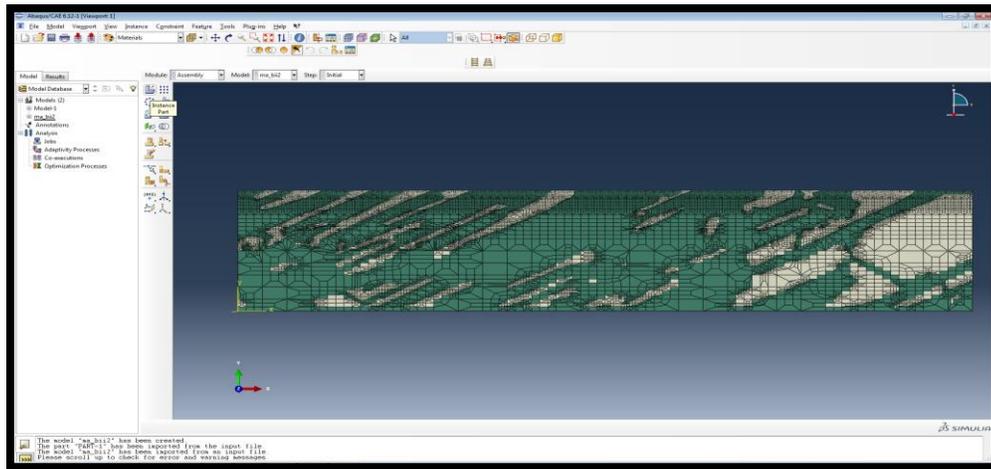
Fuente: Propia

Paso 4 Modulo ensamblaje:

En el módulo ensamble, se requiere crear la relación de posición entre el indentador creado en el módulo "part" y el sustrato, para ello se da clic en instancia de parte (ver figura D-16), luego se selecciona la parte que se quiere unir (nodo del sustrato) y automáticamente el indentador cambia de posición, como se ilustra en la figura D-17 y D-18. Los sistemas de coordenadas utilizado para la unión se muestran a continuación

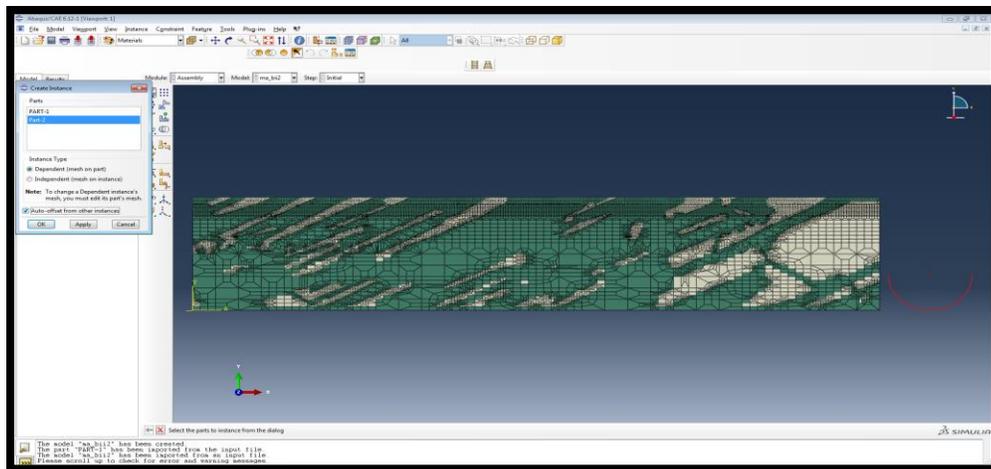


Figura D-16. Creacion de instancias entre las partes creadas (Indentador-Sustrato)



Fuente: Propia

Figura D-17. Selección de instancias entre las partes creadas (Indentador-Sustrato)

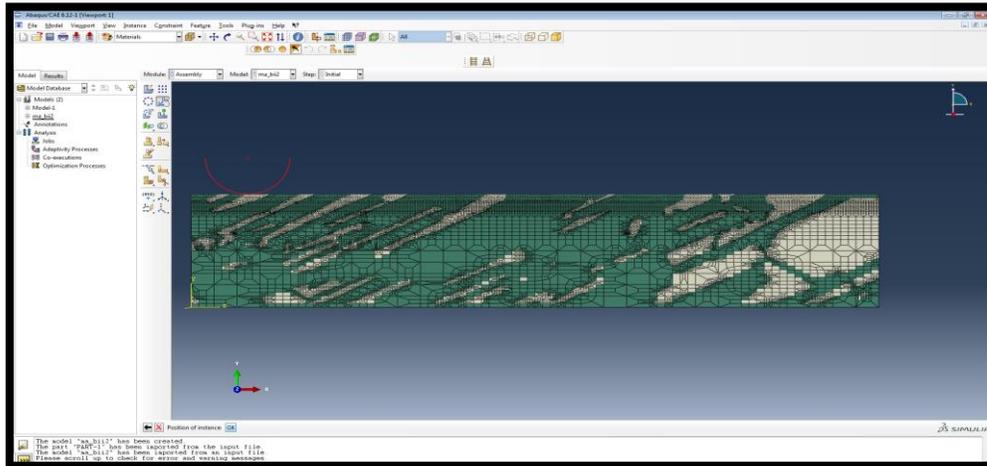


Fuente: Propia

Posteriormente, se ingresa los puntos en los cuales estarán en contacto el indentador y uno de los nodos del sustrato, para el caso se utiliza la coordenada (4,9.402), donde el primera valor obedece al nodo en x “y” la segunda coordenada es la altura que presenta el sustrato o en su defecto el eje y.



Figura D-18. Puesta a punto del indentador en función del sustrato



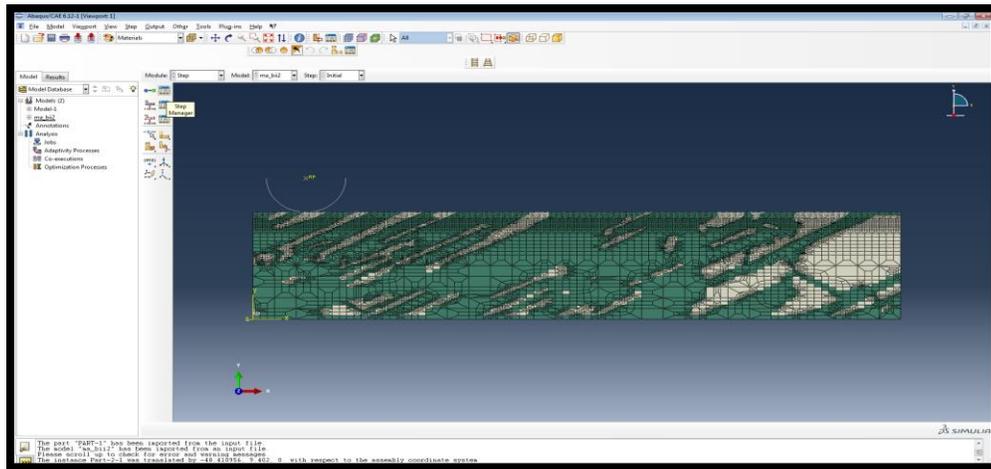
Fuente: Propia

Paso 5: Modulo de pasos

El módulo de paso se define como el tiempo de aplicación de cierta carga sobre un elemento. Para la creación de los pasos, se da clic en el administrador de pasos, a continuación, se selecciona create y a partir de esto, se despliegan dos opciones, la primera, es comunicarle al software que el cálculo lo realice de forma lineal (ver figuras D-19, D-22). Sin embargo, el comportamiento del esfuerzo y la deformación, no son necesariamente lineales en la región plástica, por esta razón se activa el modo Nlgeom, el cual se encarga de confirmar al software que realice el cálculo del modelo, teniendo en cuenta factores no lineales

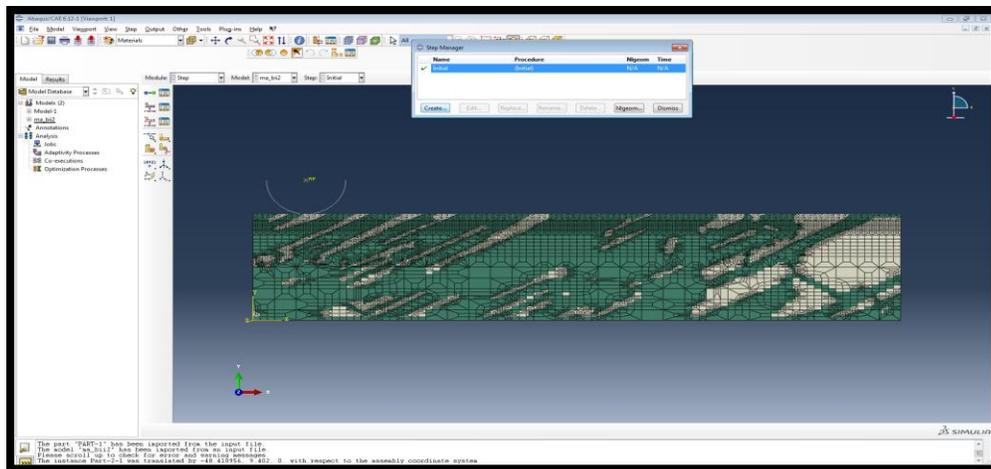


Figura D-19. Administrador de pasos



Fuente: Propia

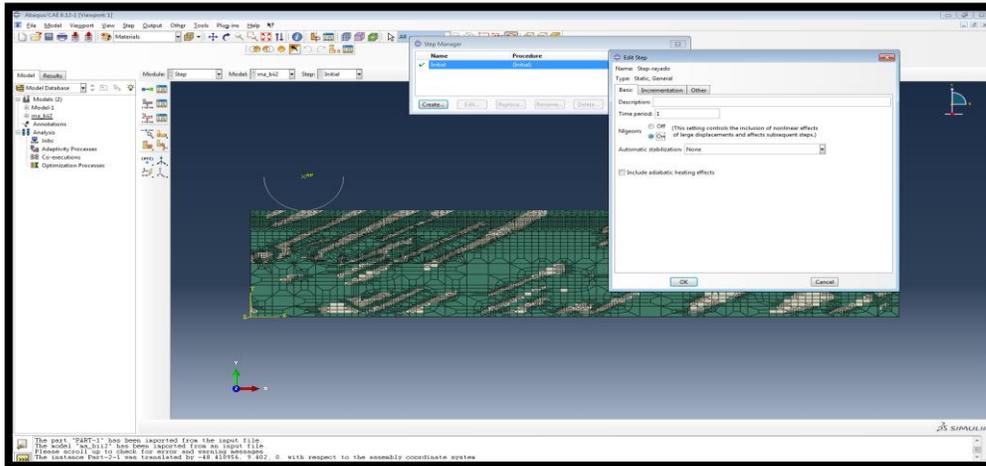
Figura D-20. Creacion de pasos



Fuente: Propia

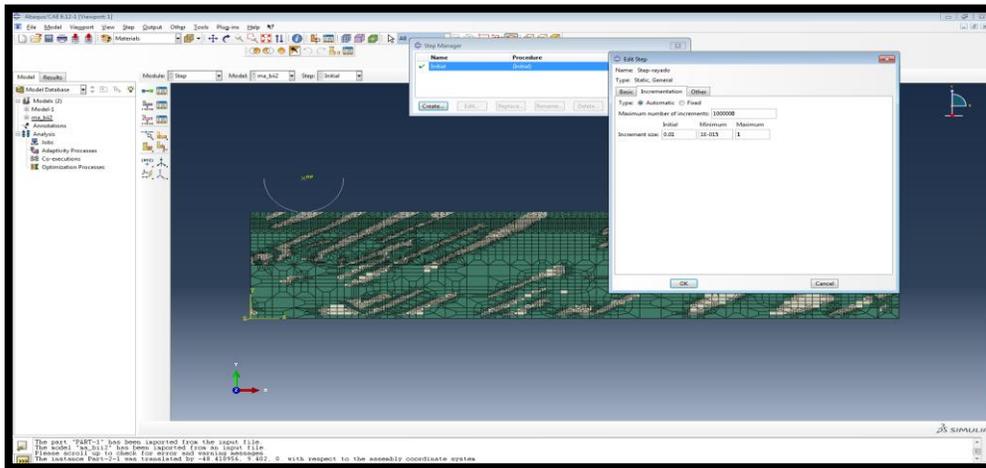


Figura D-21. Creacion de paso rayado condicion Nlgeom



Fuente: Propia

Figura D-22. Condiciones de cada uno de los pasos

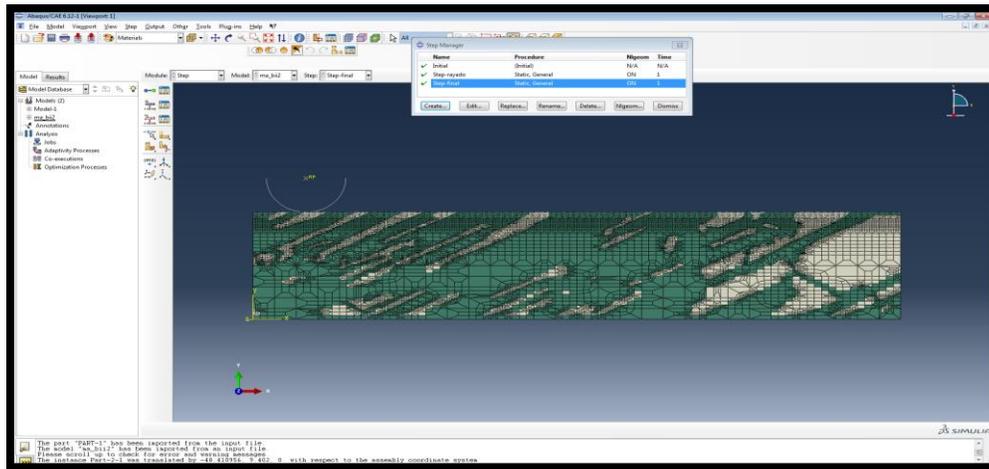


Fuente: Propia

El modulo de pasos esta constituido por tres modulos, el primer paso es el determinado por el software Abaqus, el segundo hace alusion a el procedimiento de rayado, y el tercer modulo trata del retiro por parte del indentador, una vez terminado el ensayo al final de la trayectoria (ver figura D-23)



Figura D-23: Interfaz de los numeros de pasos

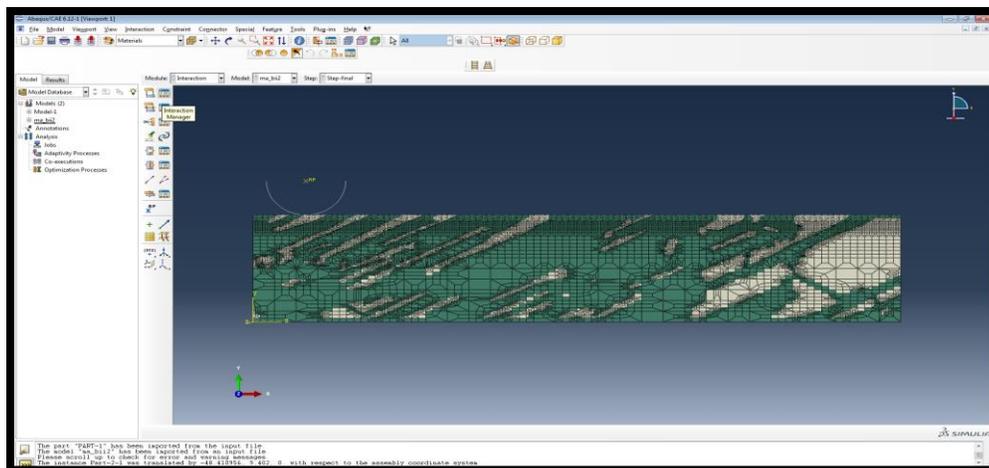


Fuente: Propia

Paso 6: Modulo de interacciones

Las interacciones, son los fenómenos a los que estarán sometidos las dos partes, los cuales corresponden a fuerza tangencial con un esfuerzo de tensión en la parte trasera de la punta y compresivo en la parte delantera. La creación de estas interacciones tienen lugar en el administrador de interacciones, siguiendo la misma secuencia de los de más módulos, la cual corresponde en dar clic sobre “create”, luego “Surface to Surface contact”(ver figura D-25), “geometry” se selecciona el indentador, se da clic en done, se selecciona la región magenta (ver figura D-26), a continuación “node región”, “mesh” by feature Edge” y se selecciona la parte superior del sustrato que estará en contacto con el indentador, posteriormente en el icono inferior se da clic en “create interaction property”, “mechanical behavior” y se selecciona “tangential behavior” y “normal behavior”, luego se da clic en done y automáticamente el punto que está en contacto del indentador con los nodos de la superficie, se tornan de color amarillo como se observa en la figura D-27.

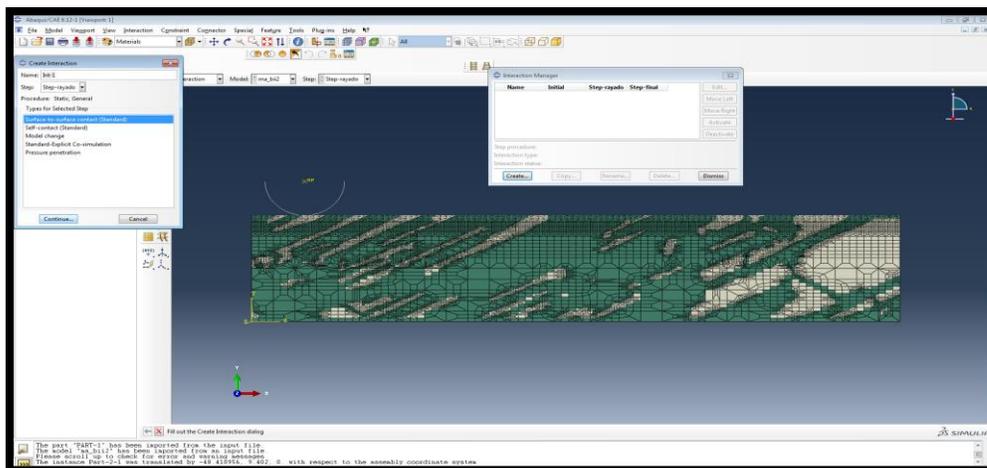
Figura D-24: Administrador de interacciones en el contacto



Fuente: Propia

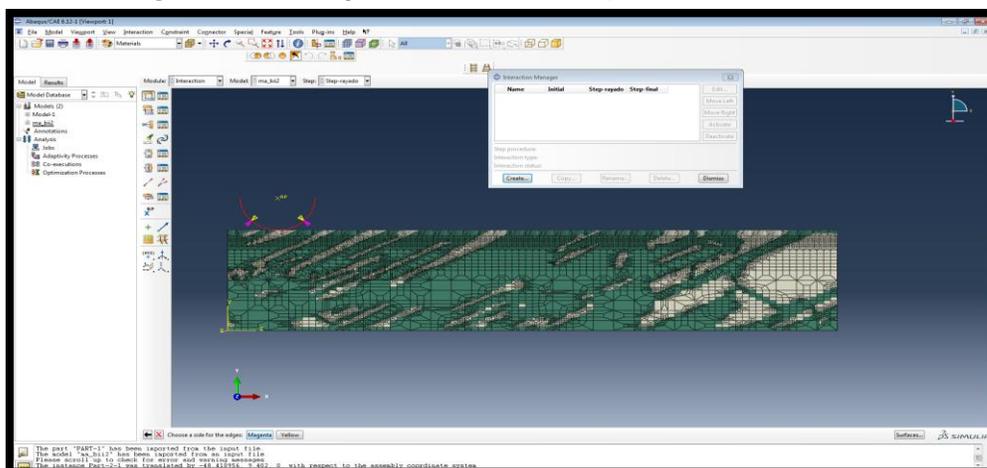


Figura D-25: Contacto de superficie a superficie



Fuente: Propia

Figura D-26: Region del indentador que estara en contacto



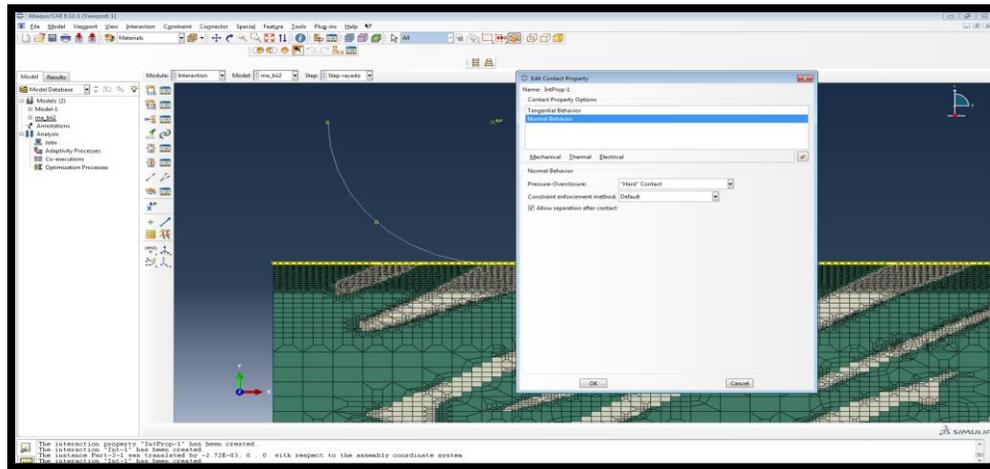
Fuente: Propia

La variacion en el coeficiente de friccion se realiza dando clic en tangential behavior y cambiando la opcion frictionless por penalty y sus valores son:

- 0
- 0.1
- 0.3



Figura D-27: Comportamiento por contacto de tipo normal



Fuente: Propia

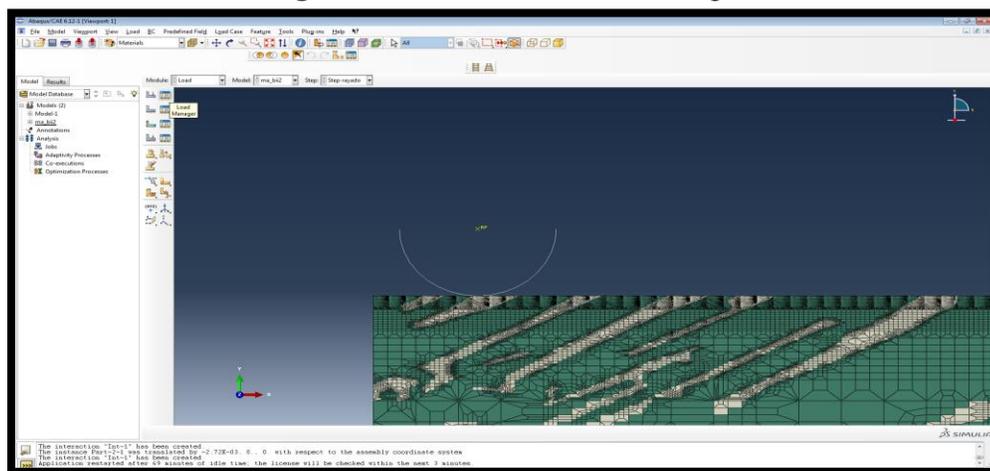
Paso 7: Modulo de cargas:

El rango de las fuerzas en el indentador corresponden a valores de:

- 0.5 N
- 0.1 N
- 0.05 N

La creacion de la fuerza , se lleva a cabo por medio del administrador de cargas (ver figura D-28), su ubicación y selección se realiza en el punto de referencia, como se observa en la figura D-29.

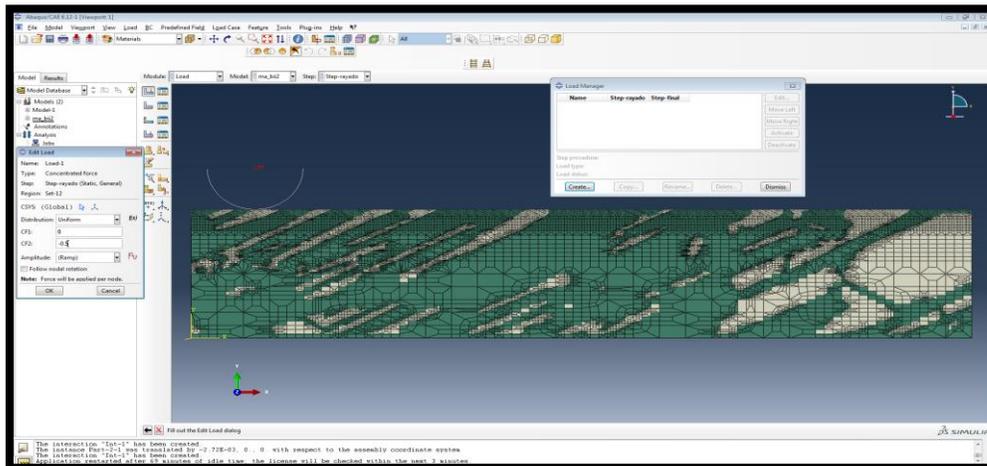
Figura D-28:Administrador de cargas



Fuente: Propia



Figura D-29: Asignación de carga



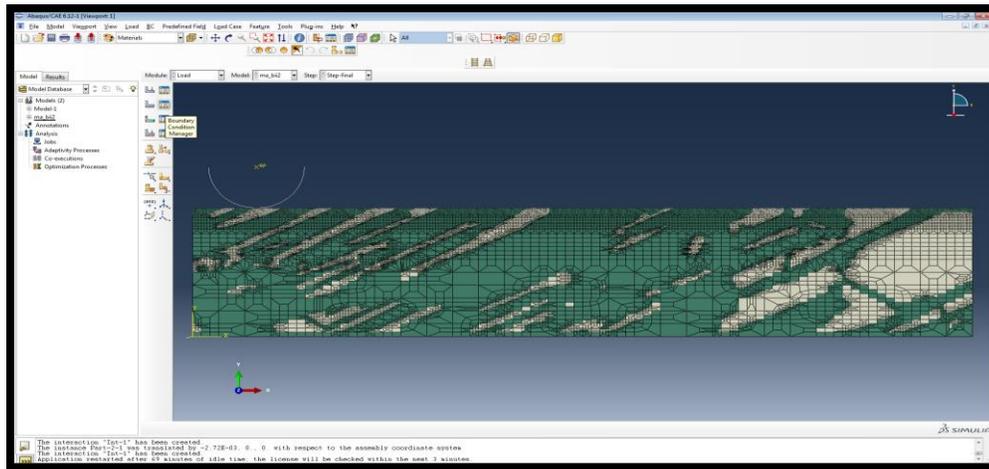
Fuente: Propia

Las condiciones de contorno se crean en el “boundary condition manager” y para el caso de estudio se tienen en cuenta tres factores. Primero la parte inferior del sustrato debe tener una reacción de tipo encastre (empotramiento) (figura D-32), los dos segmentos laterales tienen esta misma condición, a diferencia de su reacción final la cual es YASYM, como se observa en la figura D-33 y D-34, lo que significa la restricción del sustrato en el eje X, Y y Z por parte de los laterales del sustrato.

La partícula presenta la última condición llamada “displacement and rotation” y en ella se ingresa la longitud del rayado y en el paso final el retiro del indentador (ver figura D-35 y D-36)

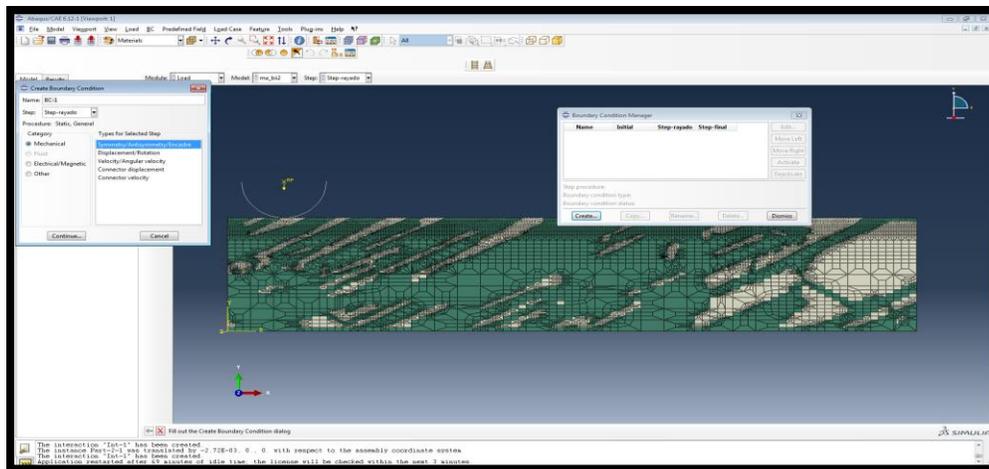


Figura D-30: Condiciones de frontera del sistema indentador-sustrato



Fuente: Propia

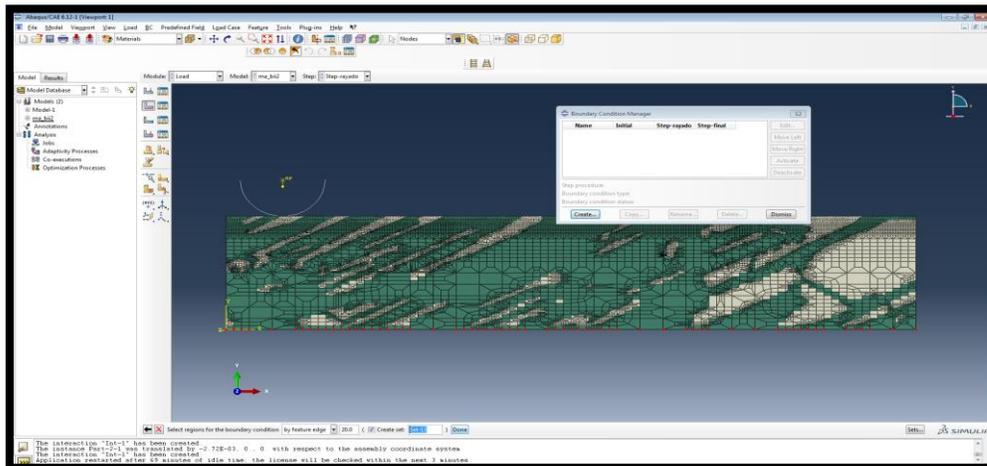
Figura D-31: Reaccion de empotramiento (Encastre)



Fuente: Propia

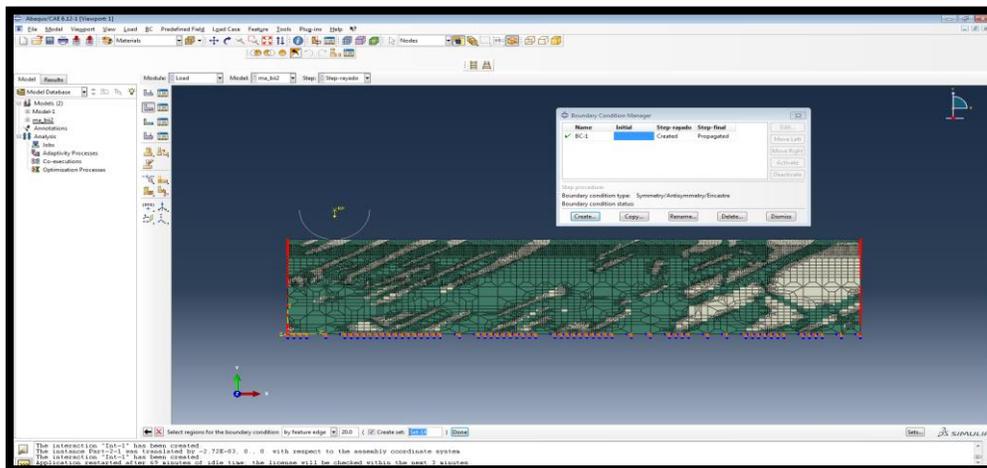


Figura D-32: Empotramiento en la parte inferior del sustrato



Fuente: Propia

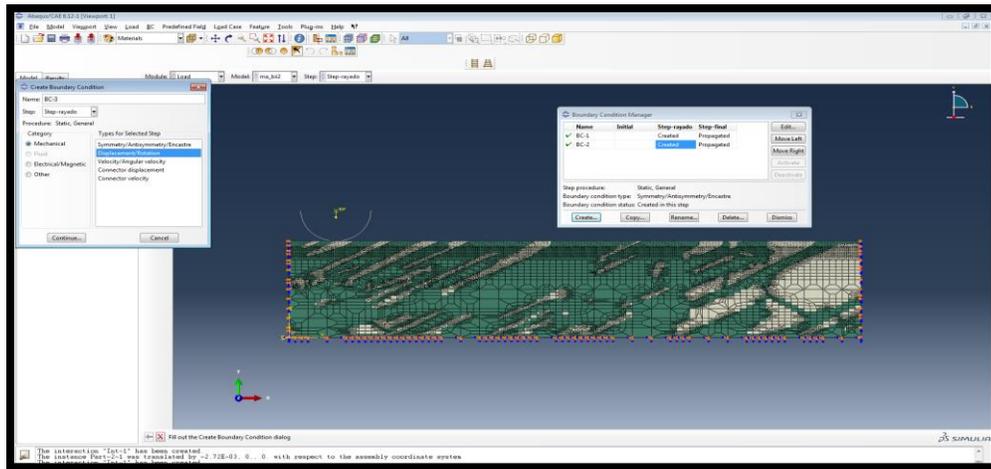
Figura D-33: Empotramiento en los laterales del sustrato



Fuente: Propia

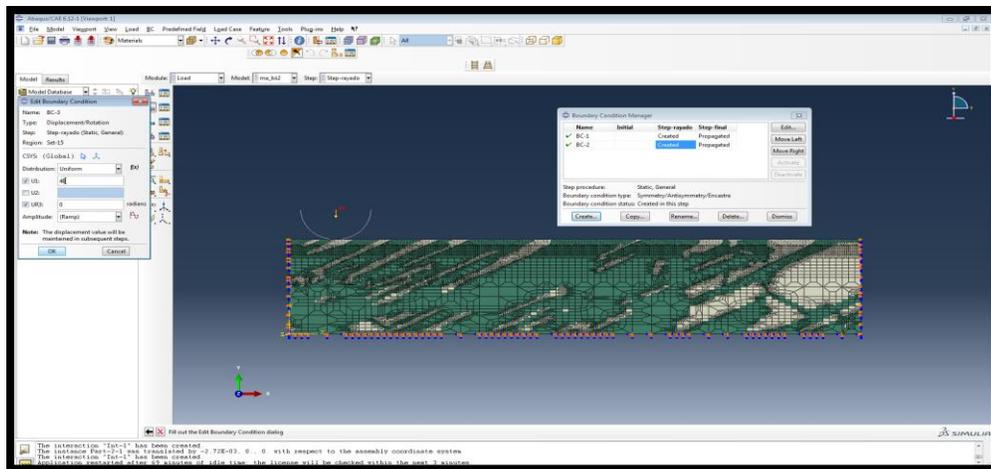


Figura D-34: Condición de desplazamiento de la partícula



Fuente: Propia

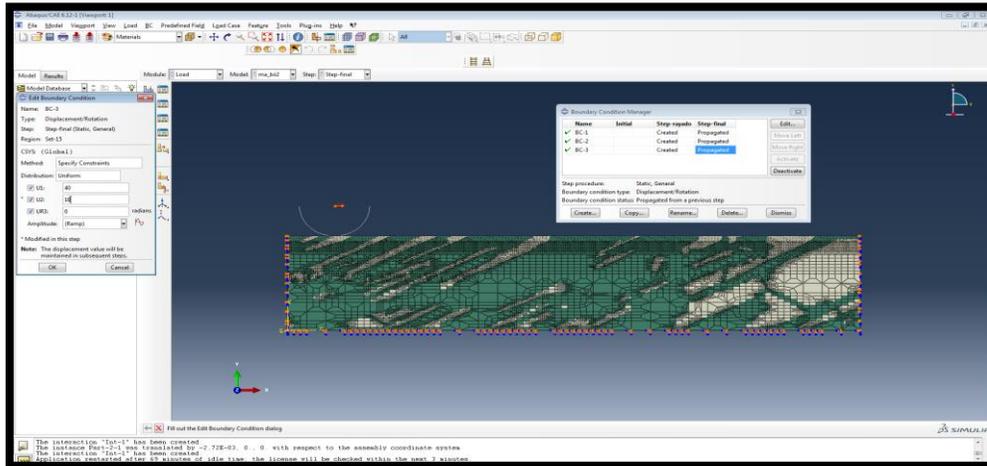
Figura D-35: Longitud de recorrido por parte del indentador



Fuente: Propia



Figura D-36: Condición final para retirar el contacto entre indentador y sustrato

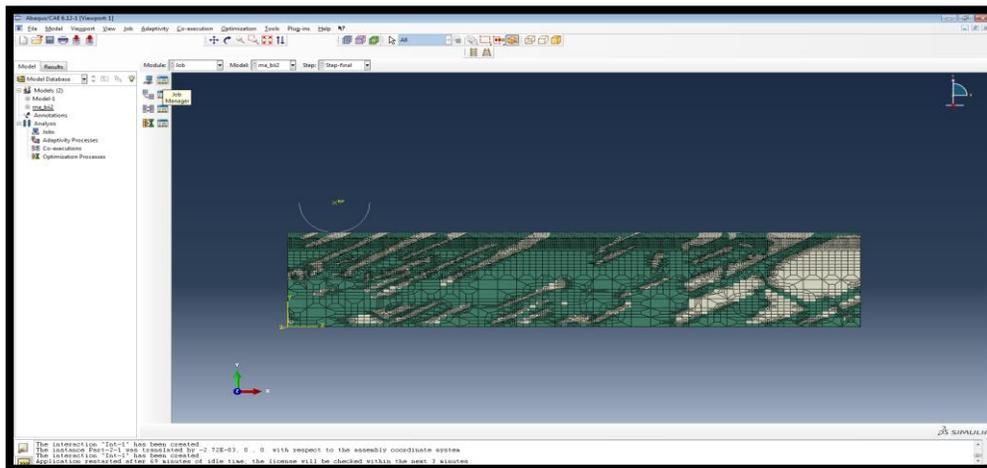


Fuente: Propia

Paso 7: Modulo Job

El módulo de trabajo, es el encargo de generar el archivo de salida.odb, donde se guarda los resultados de la simulación, para la creación del archivo se debe dar clic en “Job manager” al igual que en los demás administradores se da clic en create y posteriormente se ingresa el nombre con el que se quiere guardar el archivo (ver figura D-37 y D-38), luego se oprime la opción submit y la simulación empieza a correr (ver figura D-39).

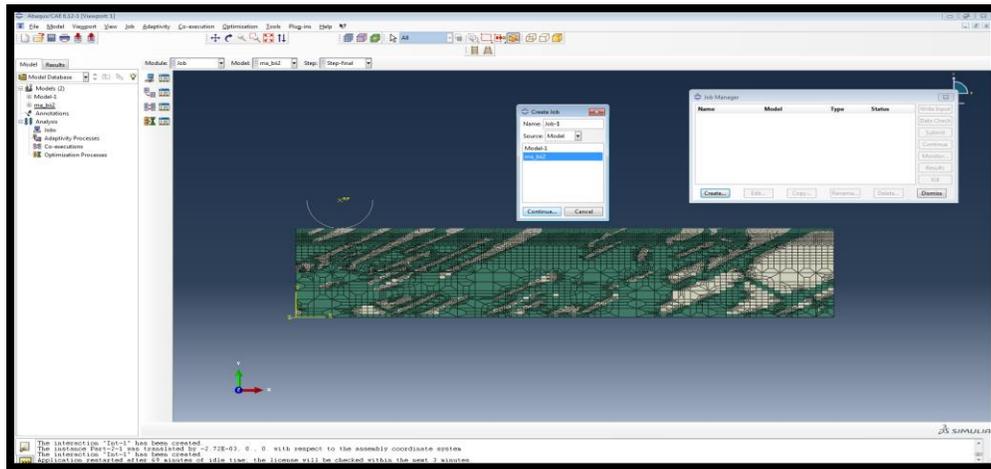
Figura D-37: Administrador de trabajo



Fuente: Propia

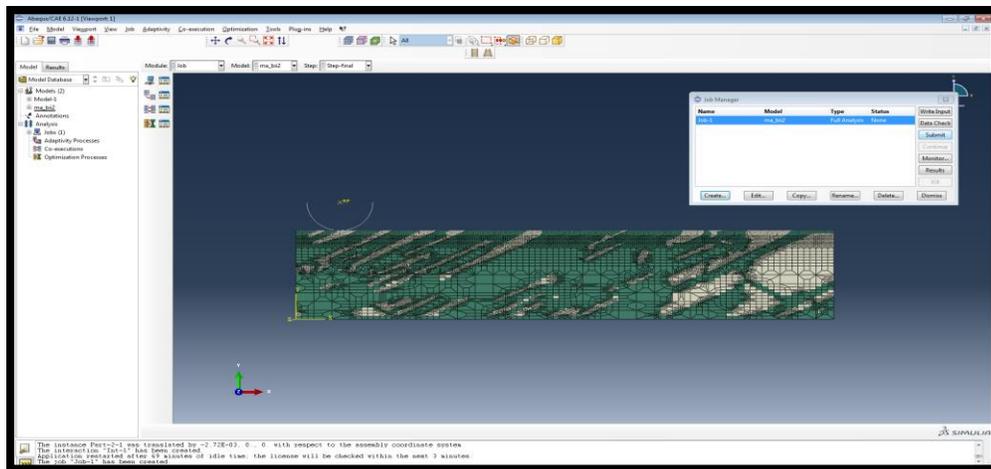


Figura D-38: Modulo de trabajo



Fuente: Propia

Figura D-39: Monitoreo de simulación



Fuente: Propia

