

SIMULACIÓN DE LOS CAMBIOS DE FASE EUTÉCTICO Y EUTECTOIDE DE UNA FUNDICIÓN DE GRAFITO ESFEROIDAL

Fernando D. Carazo^a, Patricia M. Dardati^a, Diego J. Celentano^b y Luis A. Godoy^c

^a*Dpto. Mecánica - CIII, Facultad Regional Córdoba, Universidad Tecnológica Nacional, Maestro M. López esq. Cruz Roja Argentina s/n, Ciudad Universitaria, Córdoba, Argentina, fslack@gmail.com, pdardati@industrial.frc.utn.edu.ar, <http://www.frc.utn.edu.ar>*

^b*Departamento Ingeniería Mecánica y Metalúrgica, Pontificia Universidad Católica de Chile, Santiago de Chile, Chile, Av. Vicuña Mackenna 4860, Macul, Santiago de Chile, Chile, dcelentano@ing.puc.cl, <http://www.ing.puc.cl>*

^c*Departamento Estructuras, Universidad Nacional de Córdoba, Av. Vélez Sarsfield 1601, Córdoba, Argentina, lgodoy@com.uncor.edu, <http://www.efn.unc.edu.ar>*

Palabras clave: fundición nodular, elemento finito, transformación eutectoide, ferrita, perlita.

Resumen. Muchas de las propiedades mecánicas de un material fundido dependen de su microestructura, de aquí la importancia de poder conocer su evolución durante el enfriamiento, desde que la pieza es colada hasta que alcanza la temperatura ambiente. En este trabajo se presenta un modelo matemático que describe los procesos termo-metalúrgicos que experimenta una fundición esférica de composición eutéctica durante su enfriamiento. La transformación eutéctica, que se lleva a cabo durante la solidificación de la aleación, es modelada siguiendo una teoría plurinodular. La transformación eutectoide, que corresponde al cambio de fase sólido-sólido del material, se modela considerando la nucleación instantánea de la ferrita y su crecimiento gobernado por el proceso de difusión de átomos de carbono desde la austenita hacia el grafito. En la transformación metaestable de la austenita, la perlita nuclea de forma instantánea en los bordes de grano de austenita, y la densidad de núcleos de perlita se calcula a partir de una ley empírica; el crecimiento de la perlita se desarrolla considerando los granos de perlita como partículas esféricas en el borde de los granos de austenita. La evolución térmica de la aleación durante su enfriamiento se obtiene resolviendo la ecuación de energía mediante el método de los elementos finitos, y el acoplamiento térmico-microestructural se realiza mediante el método del calor latente. Se presenta un estudio de sensibilidad del modelo propuesto a la variación de parámetros fundamentales, utilizando para esto un elemento unidimensional de dos nodos. Los resultados obtenidos concuerdan cualitativamente con los registrados en la bibliografía. Por último, los resultados son analizados y se exponen las conclusiones.

1. INTRODUCCIÓN

Una de las aleaciones de hierro más utilizadas en la actualidad es la llamada fundición de grafito esferoidal o fundición nodular. Estas aleaciones de hierro se caracterizan por solidificar con un eutéctico formado por esferas de grafito rodeadas por una matriz de hierro. A elevadas temperaturas, la matriz de hierro está formada por austenita (γ); a más bajas temperaturas, la austenita se transforma en grafito y ferrita (α) según un sistema estable, en perlita ($\alpha + Fe_3C$) según un sistema metaestable o en ambos.

Muchos son los estudios que desde hace tiempo se vienen llevando a cabo para simular el proceso de enfriamiento que experimenta un material fundido, desde que es colado hasta alcanzar la temperatura ambiente. En un principio, los modelos usados para simular el enfriamiento eran macroscópicos; éstos podían predecir el tiempo de solidificación y la curva de enfriamiento, pero no la evolución microestructural del material, la cual guarda una estrecha relación con las propiedades finales del mismo. Fue entonces que, para tener en cuenta dicha evolución, se empezaron a incorporar modelos microscópicos, que consideran la cinética de las transformaciones de fase que tienen lugar durante el enfriamiento de la aleación. La implementación computacional de modelos microscópicos y su acoplamiento a los modelos macroscópicos es un tema de permanente estudio hoy en día, dado que nos permite predecir las microestructuras finales de una pieza fundida y por lo tanto sus propiedades mecánicas, a un costo bajo en comparación con el de los ensayos experimentales.

En la actualidad son dos las teorías que explican el proceso de solidificación de la fundición nodular: la teoría uninodular y la teoría plurinodular (Sikora et al., 2001; Rivera et al., 1999). La primera postula que los nódulos de grafito nuclean en el líquido, en tanto la austenita nuclea y crece en forma esférica alrededor de los nódulos de grafito. El crecimiento de ambas fases se da por la difusión del carbono desde el líquido hacia el grafito a través de la envoltura esférica de austenita. La segunda, de mayor aceptación en la actualidad, sostiene que tanto el grafito como la austenita nuclean independientemente uno del otro en el líquido, y es durante el crecimiento dendrítico de la austenita que ésta alcanza y rodea a los nódulos de grafito formando el grano eutéctico. A medida que la temperatura disminuye, la solubilidad del carbono en la austenita disminuye y el carbono rechazado de la austenita va hacia los nódulos de grafito que siguen creciendo. Cuando la temperatura alcanza el valor correspondiente al equilibrio estable, la austenita se transforma en ferrita (Venugopalan, 1990). A medida que la temperatura sigue descendiendo y la transformación eutéctico estable ($\gamma \rightarrow \alpha$) progresa, el grado de enriquecimiento en carbono de la austenita residual es mayor, al llegar a la temperatura eutéctico metaestable, la austenita transforma en ferrita más cementita ($\alpha + Fe_3C$), formando un componente laminar típico de las aleaciones de hierro llamado perlita. Ambos cambios de fase, austenita-ferrita ($\gamma \rightarrow \alpha$) y austenita-perlita ($\gamma \rightarrow \alpha + Fe_3C$), pueden ser estudiados y explicados como dos procesos, uno de nucleación y otro de crecimiento (Porter and Easterling, 2000; Reed Hill, 1979; Guo and Stefanescu, 1997; Shewmon, 1969). La ferrita nuclea en el contorno de los nódulos de grafito, donde la fase austenita es pobre en carbono, una vez que la ferrita ha nucleado, su crecimiento se da por la difusión de los átomos de carbono desde la austenita hacia los nódulos de grafito, que actúan como sumideros de átomos de carbono, formando una envoltura esférica alrededor de los nódulos de grafito. Esto da lugar a la forma típica del grano eutéctico del hierro nodular conocida como ojo de buey (Venugopalan, 1990). En el cambio de fase austenita-perlita, la mayoría de los trabajos que consideran la nucleación de la perlita suponen que se desarrolla heterogéneamente y casi con exclusividad en los bordes de grano de austenita; esto supone una idealización dado que considera que la composición de la fase

austenita es uniforme y homogénea, lo cual no se da en la realidad. La austenita no tiene una composición homogénea sino que tiene gradientes de concentración, además de precipitados, inclusiones y otros tipos de defectos, siendo todos estos sitios de alta energía, por lo que favorecen la nucleación de la perlita tanto en el borde de grano austenítico como en el interior del mismo (Reed Hill, 1979; Porter and Easterling, 2000). Actualmente, no existen estudios que aseveren cómo es el proceso de nucleación de una colonia perlítica, razón por la cual sólo se puede conjeturar acerca del mecanismo de dicho proceso. Cuando la austenita se enfría por debajo de la temperatura eutectoide metaestable, tanto la cementita como la ferrita nuclean y crecen juntas formando la perlita. La perlita nuclea en los límites de grano de austenita y crece a una velocidad promedio constante, formando esferas o semiesferas en los bordes. A pequeños sobreenfriamientos el número de núcleos de perlita es relativamente pequeño, y el aumento de la fracción de perlita se da tanto por la nucleación de nuevos granos como por el crecimiento de los ya existentes. A grandes sobreenfriamientos, existe una saturación de los sitios de nucleación, por lo que la transformación continúa simplemente por el crecimiento de los granos de perlita dentro de los granos de austenita (Shewmon, 1969; Mehl, 1948; Hillert, 1962).

En el caso de la fundición esferoidal, los parámetros fundamentales, de los que serán función sus propiedades mecánicas, son el tamaño de los nódulos de grafito y las cantidades de ferrita y de perlita (Lacaze and Gerval, 1998). A partir de estudios experimentales, se sabe que el contenido de ferrita y perlita en el hierro esferoidal dependerá principalmente de su composición química, de la velocidad de enfriamiento y del tamaño y número de nódulos de grafito obtenidos al final de la solidificación. Elementos de aleación tales como el Cu, Sn, Mn, Mg y el V, son perlitizantes, con lo cual aumentan la dureza del material a costa de disminuir su ductilidad, en tanto la presencia de Si como aleante favorece la formación de ferrita y permite obtener un material dúctil. Finalmente, una elevada densidad de nódulos de grafito promueve la formación de ferrita a igualdad de las otras condiciones.

Muchos son los trabajos que estudian los cambios de fase en la fundición de grafito esferoidal, la mayoría de ellos dedica su esfuerzo a la solidificación (Boeri, 1989; Dardati, 2005; Dardati et al., 2006, 2007; Sikora et al., 2001; Rivera et al., 1999), siendo menos los trabajos que han estudiado el cambio de fase eutectoide en este material (Dardati et al., 2007; Guo and Stefanescu, 1997; Lacaze and Gerval, 1998; Venugopalan, 1990; Catalina et al., 2000), y aún cuando lo han hecho, la mayoría considera transformaciones isotérmicas, aplicables, por ejemplo, a tratamientos térmicos, y siendo pocos los casos que tratan enfriamiento continuo. La mayor parte de los modelos propuestos para la transformación perlítica utilizan la regla de aditividad aplicada a la fórmula de Johnson-Mehl-Avrami.

En este trabajo se presenta un análisis de sensibilidad de un modelo que simula el enfriamiento de una fundición nodular de composición eutéctica. Dicho modelo tiene en cuenta, tanto el proceso de solidificación como la transformación eutectoide del material. La simulación del proceso de solidificación se realiza basándose en una teoría plurinodular (Dardati, 2005; Dardati et al., 2006). La transformación eutectoide considera nucleación instantánea tanto para el cambio de fase estable como el metaestable instantánea. El crecimiento de la ferrita se da por la difusión del carbono desde la austenita hacia el nódulo de grafito a través de la ferrita. La perlita nuclea instantáneamente cuando la temperatura alcanza el valor de la transformación eutectoide metaestable, la densidad de nódulos de perlita se considera función del tamaño promedio de sus diámetros (Munirajulu et al., 1994).

En la sección 2 de este trabajo se desarrollan los modelos microestructurales utilizados para simular la transformación eutéctica y eutectoide. En la sección 3 el modelo es implementado en un elemento simple de dos nodos. Por último, en la sección 4 se presentan las conclusiones.

2. MODELO MICROESTRUCTURAL

La evolución de la temperatura se obtiene resolviendo numéricamente la ecuación de la energía a nivel macroscópico mediante el método de los elementos finitos. La cinética de las transformaciones es acoplada a la ecuación de energía a nivel macroscópico mediante el método del calor latente (Celentano et al., 1994).

2.1. Transformación Eutéctica

La solidificación de una fundición de grafito esferoidal de composición eutéctica según un sistema estable, se caracteriza por la transformación del metal líquido en asutenita y grafito esferoidal. En este trabajo, la solidificación del material se simula mediante un modelo basado en una teoría plurinodular. Este considera que tanto el grafito como la austenita nuclean en forma independiente en el metal líquido, y son las dendritas de austenita las que en su crecimiento van rodeando los nódulos de grafito para dar la estructura típica del grano eutéctico de la fundición esferoidal, consistente en un grano de austenita dendrítico que incluye a numerosos nódulos de grafito en su interior (Dardati, 2005; Dardati et al., 2006).

2.1.1. Nucleación y crecimiento del grafito

La nucleación del grafito se considera continua, finalizando cuando se alcanza la recalcificación, según la siguiente expresión

$$\dot{N}_{gr} = b\Delta T e^{-\frac{c}{\Delta T}} (1 - f_s) \quad (1)$$

En la ecuación (1), b y c son parámetros constantes que dependen de la composición de la aleación y del tratamiento del líquido, \dot{N}_{gr} representa la derivada de la densidad de nódulos de grafito con respecto al tiempo, ΔT es el sobreenfriamiento del líquido con respecto a la temperatura eutéctica y f_s es la fracción sólida. El modelo contempla la nucleación del grafito en dos zonas, el líquido interdendrítico y el líquido intergranular, correspondientes a la zona 2 (z_2) y a la zona 3 (z_3) respectivamente, ver figura(1).

El crecimiento de los nódulos de grafito está gobernado por la difusión de los átomos de carbono. Este modelo considera el grano de austenita dividido en tres zonas, figura (1). Los nódulos de grafito que han sido rodeados en su totalidad por la austenita (zona 1 para el modelo), dejan de crecer, en tanto los nódulos de grafito que se encuentran en las zonas 2 y 3 crecen según las ecuaciones (2) y (3) repectivamente

$$\frac{dR_{gr}}{dt} = \frac{D_c^l (C^{l/\gamma'} - C^{l/gr}) \rho_l}{R_{gr} (C^{gr} \rho_{gr} - C^{l/gr} \rho_l)} \quad (2)$$

$$\frac{dR_{gr}}{dt} = \frac{D_c^l (C'_{pro} - C^{l/gr}) \rho_l}{R_{gr} (C^{gr} \rho_{gr} - C^{l/gr} \rho_l)} \quad (3)$$

donde D_C^l es el coeficiente de difusión del carbono en el líquido, $C^{l/\gamma'}$ es la concentración de equilibrio de carbono del líquido en contacto con la austenita, $C^{l/gr}$ es la concentración de equilibrio de carbono del líquido en contacto con el grafito, C_{gr} es la concentración de carbono en el grafito, C'_{pro} es la concentración de carbono promedio del líquido de la zona 3, ρ_l y ρ_{gr} son

las densidades del líquido y del grafito respectivamente y R_{gr} es el radio del nódulo del grafito. La diferencia entre (2) y (3) es el valor de la concentración de carbono del líquido de la zona (2) y de la zona (3). En todos los casos las comillas significan que los valores correspondientes deben ser calculados luego de haber calculado el crecimiento de la austenita.

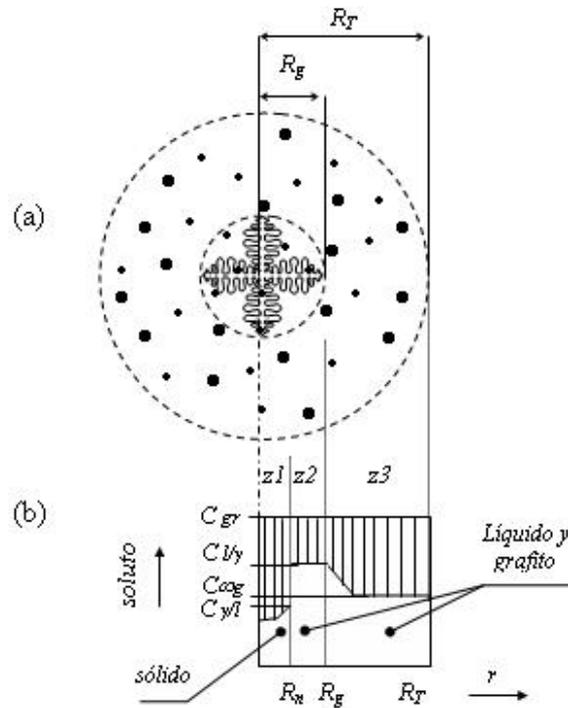


Figura 1: a) Esquema de la solidificación dendrítica equiaxial para la fundición nodular. b) Perfil de concentración del carbono en el grano eutéctico.

2.1.2. Nucleación y crecimiento de la austenita

Cuando el líquido alcanza la temperatura eutéctica estable, T_E , la austenita nuclea en forma instantánea y la ley de nucleación que gobierna el proceso es

$$N_\gamma = A \frac{dT}{dt} \quad (4)$$

el parámetro A es función del tratamiento del líquido y N_γ representa la densidad de nódulos de austenita.

Para calcular el crecimiento de la austenita, primero se determina la velocidad de crecimiento de las puntas de las dendritas principales, la cual está dada por [Pang and Stefanescu \(1996\)](#)

$$\frac{dR_g}{dt} = \frac{kD_c^l m C_0}{2\pi^2 \Gamma (k-1)} \left(\frac{C^{l/\gamma} - C_{\infty g}}{C_0} \right)^2 \quad (5)$$

donde R_g es el radio de la esfera determinada por las puntas de las dendritas principales del grano equiaxial de austenita, Γ es el coeficiente de Gibbs-Thompson, k es el coeficiente de partición que relaciona la concentración del sólido y líquido en equilibrio, m es la pendiente de

la línea de líquidus de la austenita, C_0 es la concentración de carbono inicial y $C_{\infty g}$ representa la concentración de carbono en el líquido intergranular más allá de la esfera delimitada por las puntas de las dendritas de austenita y luego de que el grafito ha crecido. El crecimiento del radio de la zona 1, está dado por

$$\frac{dR_n}{dt} = \frac{3D_C^l R_g^2 \left. \frac{\partial C}{\partial r} \right|_{R_g} + \frac{dC^{l/\gamma}}{dt} (R_g^3 - R_n^3)}{3C^{l/\gamma} (1 - k) R_n^2} \quad (6)$$

donde R_n es el radio de la zona 1.

Para una explicación detallada del modelo de la transformación eutéctica puede verse en [Dardati \(2005\)](#); [Dardati et al. \(2006\)](#).

2.2. Transformación Eutectoide

Cuando la fundición nodular de composición eutéctica alcanza la temperatura eutectoide estable, la austenita comienza a transformarse en ferrita y grafito. La nucleación de la ferrita se produce en la interfase austenita-grafito. El crecimiento de la ferrita y de los nódulos de grafito se produce por la difusión del carbono desde la austenita hacia los nódulos a través de la ferrita. Cuando el material alcanza la temperatura eutectoide metaestable, comienza la transformación de la austenita en perlita (ferrita y cementita). Los núcleos de perlita se ubican preferentemente en el borde de los granos de austenita, creciendo a una velocidad mayor que la de la ferrita ([Dardati et al., 2007](#); [Venugopalan, 1990](#); [Guo and Stefanescu, 1997](#); [Aagaard et al., 1996](#)).

Las fórmulas para el cálculo de las concentraciones de equilibrio y de las temperaturas eutectoide estable y metaestable, fueron extraídas de [Lacaze and Gerval \(1998\)](#).

2.2.1. Crecimiento del grafito

Durante la transformación eutectoide estable existe un flujo de átomos de carbono desde la austenita, a través de la ferrita, hacia los nódulos de grafito, figura (2). Este flujo de átomos de carbono provoca que el tamaño de los nódulos de grafito ya existentes aumenten, no existiendo nucleación de nuevos nódulos de grafito; esto se atribuye, fundamentalmente, a la elevada energía que requiere el grafito para nuclear en la austenita debido a las altas tensiones que existen en las transformaciones en estado sólido.

La velocidad de crecimiento del nódulo de grafito se obtiene planteando el equilibrio de masa en la interfase ferrita-grafito, resultando

$$\rho_{gr} (C^{gr} - C^{\alpha/gr}) \frac{dR_{gr}}{dt} = \rho_{\alpha} D_C^{\alpha} \left. \frac{\partial C^{\alpha}}{\partial r} \right|_{r=R_{gr}} \quad (7)$$

donde $C^{\alpha/gr}$ es la concentración de carbono de equilibrio de la ferrita en contacto con el grafito, ρ_{α} es la densidad de la ferrita, D_C^{α} es el coeficiente de difusión del carbono en la ferrita y $\left. \frac{\partial C^{\alpha}}{\partial r} \right|_{r=R_{gr}}$ es el gradiente de concentración en el límite de la ferrita en contacto con el grafito. Generalmente, el proceso de difusión del carbono a través de la ferrita se puede expresar como un proceso estacionario, con lo cual el perfil de variación del carbono a través de la ferrita lo podemos expresar como $C^{\alpha} = a + \frac{b}{r}$; los valores de las constantes a y b son determinados al analizar el valor de concentración del carbono en las dos fronteras que limitan el grano de

ferrita. Haciendo dicho análisis podemos obtener

$$\left. \frac{\partial C^\alpha}{\partial r} \right|_{r=R_{gr}} = \frac{R_\alpha (C^{\alpha/\gamma} - C^{\alpha/gr})}{R_{gr} (R_\alpha - R_{gr})} \quad (8)$$

donde R_α es el radio de la ferrita, R_{gr} es el radio del grafito, $C^{\alpha/\gamma}$ es la concentración de carbono de equilibrio en la ferrita en contacto con la austenita. Reemplazando (8) en (7), obtenemos la velocidad de crecimiento de los nódulos de grafito durante la transformación eutectoide, según

$$\frac{dR_{gr}}{dt} = \frac{\rho_\alpha D_C^\alpha (C^{\alpha/\gamma} - C^{\alpha/gr}) R_\alpha}{\rho_{gr} (C^{gr} - C^{\alpha/gr}) R_{gr} (R_\alpha - R_{gr})} \quad (9)$$

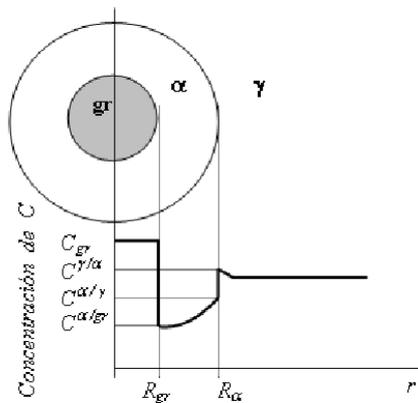


Figura 2: Variación de la concentración de carbono en las interfases grafito-ferrita y ferrita-austenita.

2.2.2. Nucleación y crecimiento de la ferrita

El sitio de nucleación de la ferrita es la interfase entre la austenita y el grafito. Un período de incubación está asociado a la cinética de la nucleación de esta fase. Algunos autores, consideran que el período de incubación es el tiempo necesario para que un núcleo de ferrita haya nucleado y crecido a un valor de la fracción volumétrica observable, siendo este valor del 1 % (Venugopalan, 1990; Lacaze and Gerval, 1998). Sin embargo, es práctica común simular este fenómeno considerando que todos los nódulos de grafito son instantáneamente rodeados por una capa de ferrita cuando el material alcanza la temperatura eutectoide estable.

El crecimiento de la ferrita se da por la difusión del carbono desde la austenita hacia el grafito. Para obtener la expresión de la velocidad de crecimiento de la ferrita se plantea la conservación de masa en la interfaz austenita-ferrita, figura (2), obteniéndose

$$\rho_\alpha (C^{\gamma/\alpha} - C^{\alpha/\gamma}) \frac{dR_\alpha}{dt} = \rho_\alpha D_C^\alpha \left. \frac{\partial C^\alpha}{\partial r} \right|_{r=R_\alpha} \quad (10)$$

donde $C^{\gamma/\alpha}$ es la concentración de carbono de equilibrio de la ferrita en contacto con la austenita, dR_α/dt velocidad de crecimiento del radio de la ferrita, $\left. \frac{\partial C^\alpha}{\partial r} \right|_{r=R_\alpha}$ es el gradiente de la concentración en el límite de la ferrita en contacto con la austenita. Siguiendo el razonamiento

hecho para el crecimiento del grafito, los valores de las constantes a y b son determinados al analizar el valor de concentración de equilibrio de carbono en las dos fronteras que limitan el grano de ferrita. Haciendo dicho análisis podemos obtener

$$\left. \frac{\partial C^\alpha}{\partial r} \right|_{r=R_\alpha} = \frac{R^{gr} (C^{\alpha/\gamma} - C^{\alpha/gr})}{R_\alpha (R_\alpha - R_{gr})} \quad (11)$$

reemplazando (11) en (10), y considerando que las densidades de la ferrita y de la austenita son iguales, podemos obtener la velocidad de crecimiento del radio de la ferrita durante la transformación eutectoide (Guo and Stefanescu, 1997; Venugopalan, 1990; Lacaze and Gerval, 1998; Dardati et al., 2007)

$$\frac{dR_\alpha}{dt} = \frac{D_\alpha^C (C^{\alpha/\gamma} - C^{\alpha/gr}) R_{gr}}{(C^{\gamma/\alpha} - C^{\alpha/\gamma}) R_\alpha (R_\alpha - R_{gr})} \quad (12)$$

2.2.3. Nucleación y crecimiento de la perlita

En los modelos de nucleación y crecimiento de la perlita que se presentan en este trabajo se consideran las siguientes hipótesis:

1. Nucleación instantánea.
2. Las colonias de perlita son todas esféricas y están distribuidas uniformemente en la matriz del material.
3. Todas las colonias pertenecientes a un mismo volumen representativo crecen a la misma velocidad.

Para modelar la nucleación y el crecimiento de la perlita, se han utilizado leyes semiempíricas. La nucleación de la perlita es instantánea y comienza cuando la temperatura ha alcanzado el valor de la temperatura eutectoide metaestable. La densidad de nódulos de perlita, está dada por

$$N_p = \frac{3\pi^2}{32(\bar{D}_p)^3} \quad (13)$$

donde, \bar{D}_p es el diámetro promedio de los nódulos de perlita, valor que puede ser determinado experimentalmente y ha sido extraído de Munirajulu et al. (1994). Se considera, que el número de granos de perlita no puede superar el número de núcleos de grafito (Lacaze and Gerval, 1998).

Al continuar descendiendo la temperatura, los nódulos esféricos de perlita crecerán. El crecimiento de la perlita a partir de la fase austenita es análogo al crecimiento de un eutéctico laminar en una fase líquida (Porter and Easterling, 2000). Con las hipótesis planteadas, el volumen de un núcleo de perlita de radio R_p , es

$$V = \frac{4}{3}\pi R_p^3 \quad (14)$$

a medida que la transformación avanza, los nódulos de perlita aumentan su volumen según

$$\frac{dV}{dt} = 4\pi r^2 \frac{dR_p}{dt} \quad (15)$$

donde dR_p/dt es la velocidad de crecimiento del radio de las esferas de perlita.

Si el crecimiento de la perlita es un proceso controlado por la difusión de los átomos de carbono en todo el volumen de la austenita, la velocidad de crecimiento de la perlita (Porter and Easterling, 2000; Munirajulu et al., 1994), es

$$\frac{dR_p}{dt} = CD_C^\gamma \left(\frac{\Delta H \Delta T}{4\sigma T_e} \right)^2 \quad (16)$$

donde, C es un valor constante, D_C^γ es el coeficiente de difusión del carbono en la austenita, ΔH es el cambio de entalpía por unidad de volumen en el material, ΔT es el sobreenfriamiento del material con respecto a la temperatura eutectoide metaestable, σ es la energía interfacial por unidad de volumen, T_e es la temperatura eutectoide metaestable. Asumiendo que los valores de ΔH y σ no varían con la temperatura, la ecuación (16), puede ser reescrita como

$$\frac{dR_p}{dt} = Q \left(\frac{\Delta T}{T_e} \right)^2 \quad (17)$$

siendo Q

$$Q = \left(\frac{\Delta H}{4\sigma} \right)^2 CD_C^\gamma \quad (18)$$

El valor de Q utilizado para los cálculos se extrajo de Munirajulu et al. (1994). La fracción transformada de perlita, la calculamos como

$$f = N_p \frac{4}{3} \pi R_p^3 \quad (19)$$

3. ANÁLISIS DE SENSIBILIDAD DEL MODELO

El modelo microestructural propuesto se acopló, por el método del calor latente, a un programa de elementos finitos capaz de resolver la ecuación del calor a nivel macroscópico.

El análisis de sensibilidad que se lleva a cabo utiliza un elemento unidimensional de dos nodos, aplicándose en uno de ellos un flujo de calor negativo constante, figura (3). Si bien la simulación

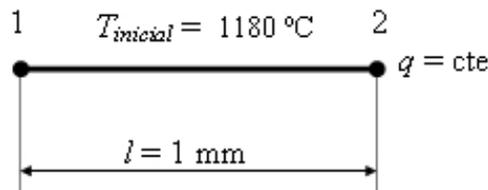


Figura 3: Elemento finito de dos nodos.

contempla tanto la solidificación como la transformación sólido-sólido, el análisis de sensibilidad se concentra en el modelo de la transformación eutectoide. Un estudio de la sensibilidad del modelo de solidificación puede verse en Dardati (2005).

Se toma un caso base con respecto al cual se varían algunas de las propiedades y parámetros fundamentales para analizar los cambios en los resultados. Los datos utilizados en el caso base

Temperatura °C	Calor Específico $kJ/kg\ ^\circ C$
20	500
600	750
800	750
1145	820
1155	840
1400	840

Tabla 1: Calor específico del material en función de la temperatura.

pueden verse en las tablas (1) y (2) y la evolución de las temperatura y de las fracciones de los microconstituyentes pueden verse en la figura (4). En el estudio de sensibilidad realizado se variaron la velocidad de enfriamiento (cambiando el flujo de calor aplicado en el nodo 2), la amplitud del intervalo entre las temperaturas de cambio de fase eutectoide estable y metaestable, el parámetro b de nucleación de los nódulos de grafito y el coeficiente de difusión del carbono en la ferrita.

Densidad de la fundición	$\rho_a = 7000\ kg/m^3$
Calor latente de solidificación	$L_{sol} = 1800\ kJ/kg$
Calor latente de la ferrita	$L_\alpha = 25000\ kJ/kg$
Calor latente de la perlita	$L_p = 60000\ kJ/kg$
Coefficiente de difusión del C en el líquido	$D_c^l = 5 \times 10^{-10}\ m^2/s$
Coefficiente de difusión del C en la ferrita	$D_c^\alpha = 2,2 \times 10^{-10}\ m^2/s$
Parámetro nucleación grafito	$b = 4,10 \times 10^{13}\ nucl/m^3\ ^\circ C s$
Parámetro nucleación grafito	$c = 340\ nucl/m^3\ ^\circ C s$
Parámetro nucleación de austenita	$A = 1,6 \times 10^7\ nucl/m^3\ ^\circ C s$
Coefficiente de Gibbs-Thompson	$\Gamma = 2,0 \times 10^{-7}\ ^\circ K/m$
Diámetro promedio de las colonias de perlita	$d = 2,0 \times 10^{-5}\ m$
Parámetro de crecimiento de la ferrita	$Q = 2,8 \times 10^{-6}\ m/s$

Tabla 2: Propiedades del material y parámetros utilizados en la simulación de la solidificación y del cambio de fase eutectoide para el caso base.

3.1. Variación de la velocidad de enfriamiento

La velocidad de enfriamiento influye sobre los resultados de la transformación eutectoide. Experimentalmente se demuestra que, a iguales composiciones, un aumento de la velocidad de enfriamiento se traduce en un aumento del porcentaje de perlita. Esto se debe a que una velocidad de enfriamiento elevada reduce el intervalo de tiempo en el que la fundición pasa de la temperatura de equilibrio estable a la de equilibrio metaestable y esto trae como consecuencia que el cambio de fase de austenita a ferrita, disponga de menos tiempo para desarrollarse sin entrar en competencia con el crecimiento de la perlita, que recién comienza a producirse a la temperatura metaestable.

En las figuras (5) y (6) se muestran las curvas obtenidas al variar la velocidad de extracción del calor del valor utilizado en el caso base a: $q = -7 \text{ J/m}^2\text{s}$ y $q = -9 \text{ J/m}^2\text{s}$, respectivamente. En la figura (7) se pueden ver las curvas de evolución de las fracciones de ferrita y de perlita para los tres valores de velocidad de enfriamiento que se han simulado.

Claramente el comportamiento del modelo se corresponde con las variaciones ya comentadas.

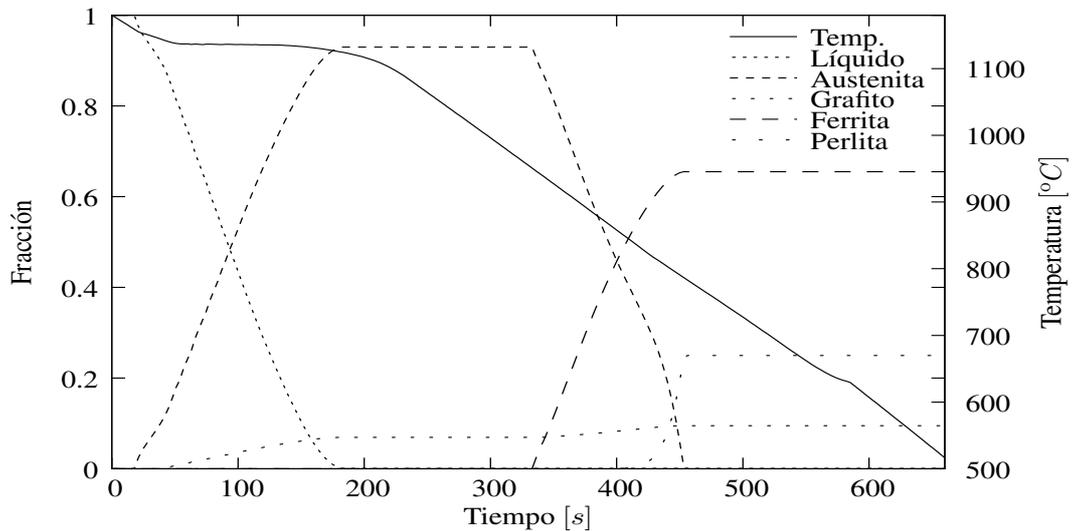


Figura 4: Evolución de la temperatura y de las fracciones para el caso base.

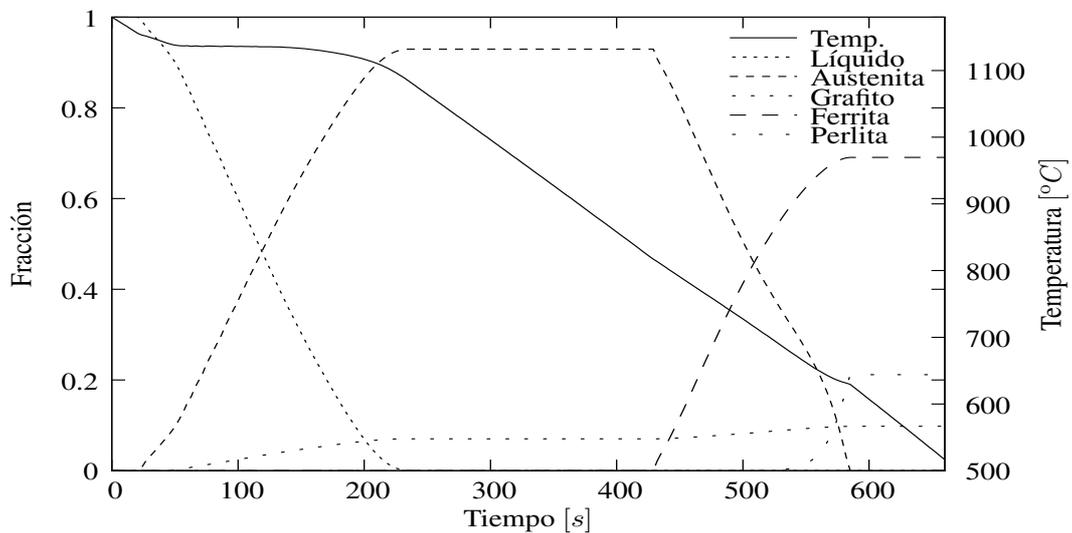


Figura 5: Evolución de la temperatura y de las fracciones para $q = -7 \text{ J/m}^2\text{s}$

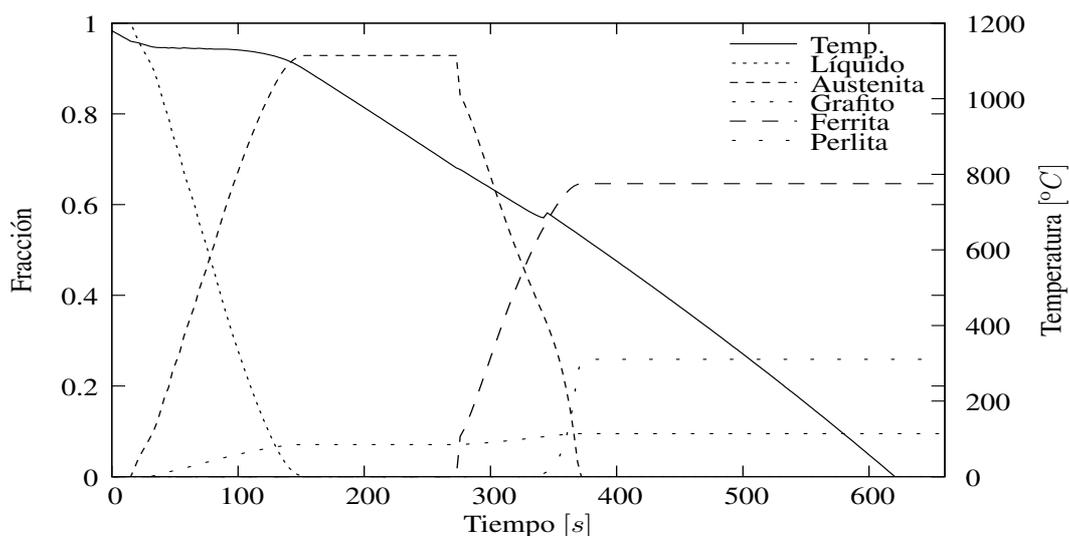


Figura 6: Evolución de la temperatura y de las fracciones para $q = -11 \text{ J/m}^2\text{s}$

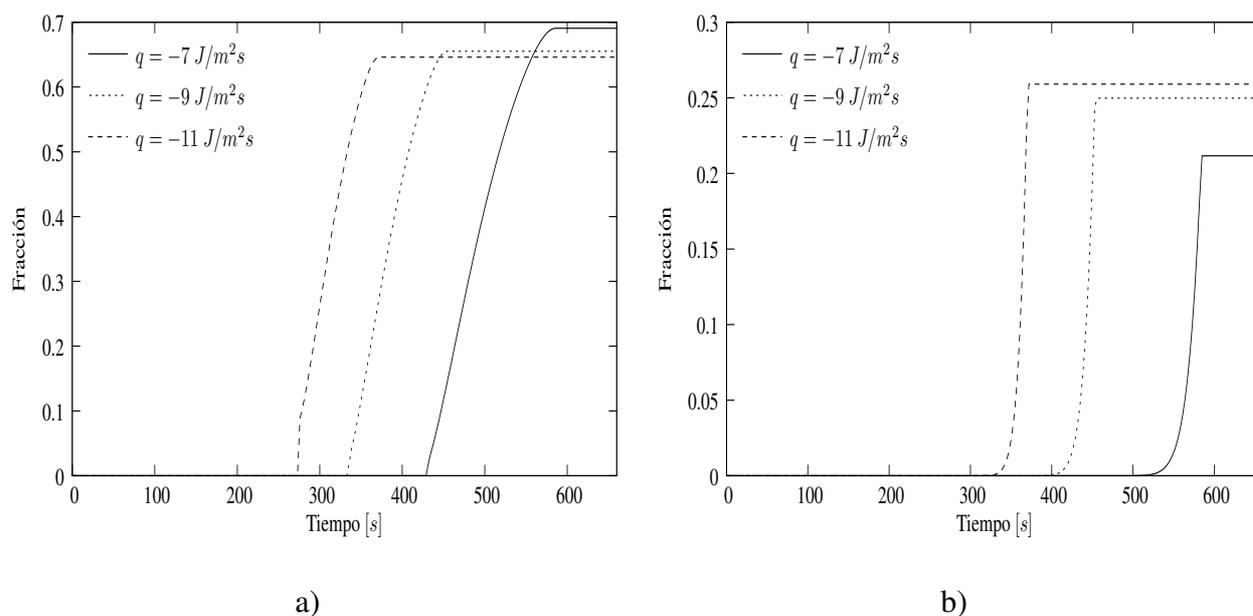


Figura 7: a - Evolución de la fracción de ferrita para los diferentes valores de q . b - Evolución de la fracción de perlita para los diferentes valores de q .

3.2. Variación de la densidad de nódulos de grafito

Experimentalmente se ha demostrado que la ferrita nuclea en los contornos de los nódulos de grafito y se desarrolla como una capa esférica alrededor de los mismos. Por esta razón, cuanto mayor sea el número de nódulos mayor será la posibilidad de nucleación y, por lo tanto, la velocidad de crecimiento de fracción de ferrita.

En el modelo implementado, la modificación del parámetro b de la ecuación (1) introduce cambios en la cantidad de nódulos de grafito que se producen en la solidificación; a mayor valor de b mayor densidad de nódulos (Boeri, 1989; Dardati, 2005). En el caso analizado, las densidades obtenidas para cada valor de b pueden verse en la tabla (3). En las figuras (8) y (9), se grafica la curva de enfriamiento y la evolución de las fracciones de las distintas fases para $b_1 = 2,0 \times 10^{13}$

y $b_3 = 6,0 \times 10^{13}$ respectivamente. En la figura (10) pueden verse los cambios que experimentan las fracciones de ferrita y de perlita. Se observa claramente que el modelo sigue la misma tendencia observada en los ensayos experimentales.

Parámetro b	$nucleos/m^3 \text{ } ^\circ C s$	$^{\circ}n \text{ nod}/m^3$
b_1	$2,0 \times 10^{13}$	$0,132 \times 10^{13}$
b_2	$4,0 \times 10^{13}$	$0,144 \times 10^{13}$
b_3	$6,0 \times 10^{13}$	$0,152 \times 10^{13}$

Tabla 3: Densidades de nódulos de grafito en función del parámetro de nucleación b .

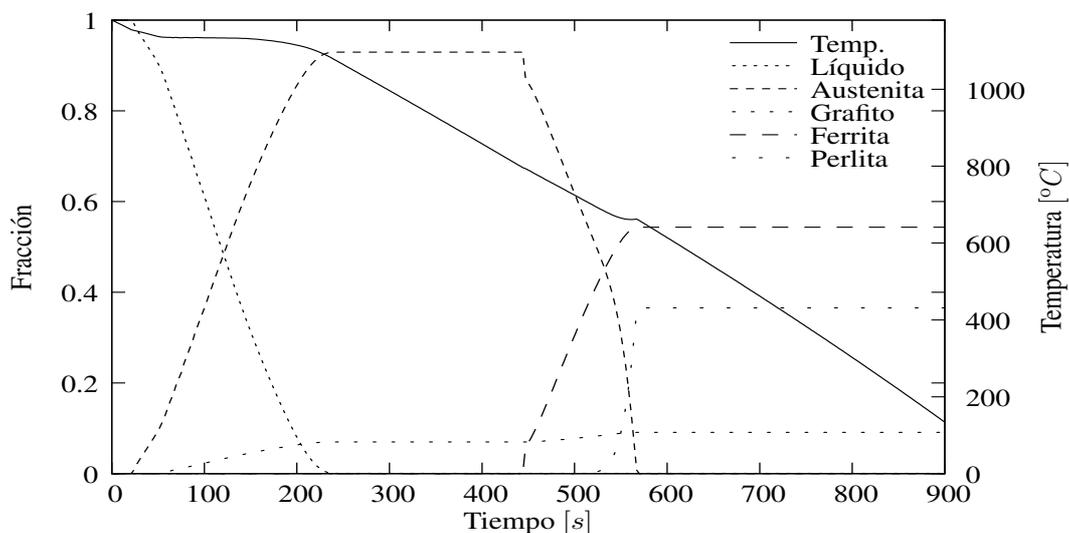


Figura 8: Evolución de la temperatura y de las fracciones para $b = 2,0 \times 10^{13} \text{ nucl./m}^3\text{Cs}$.

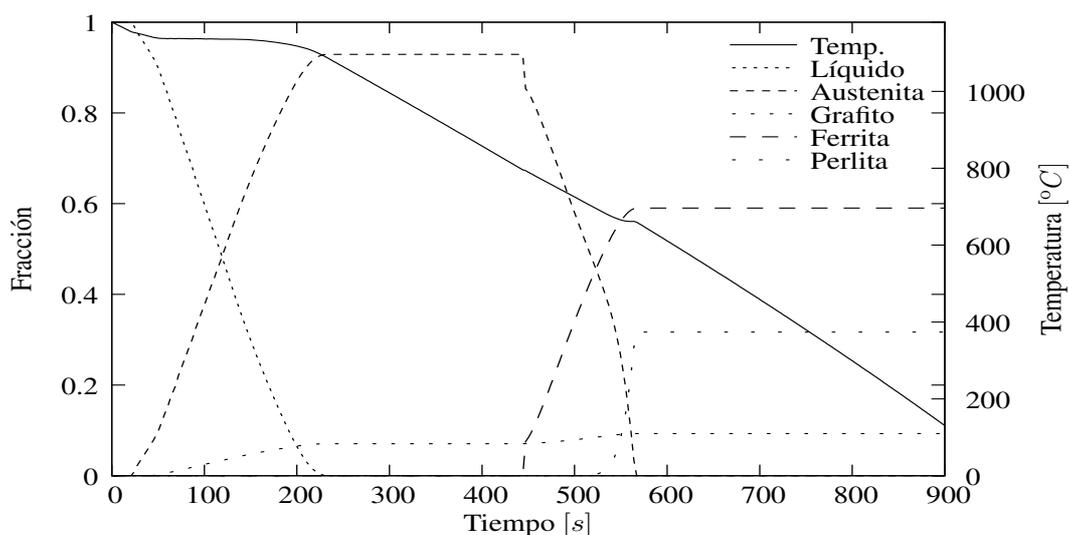


Figura 9: Evolución de la temperatura y de las fracciones para $b = 6,0 \times 10^{13} \text{ nucl./m}^3\text{Cs}$.

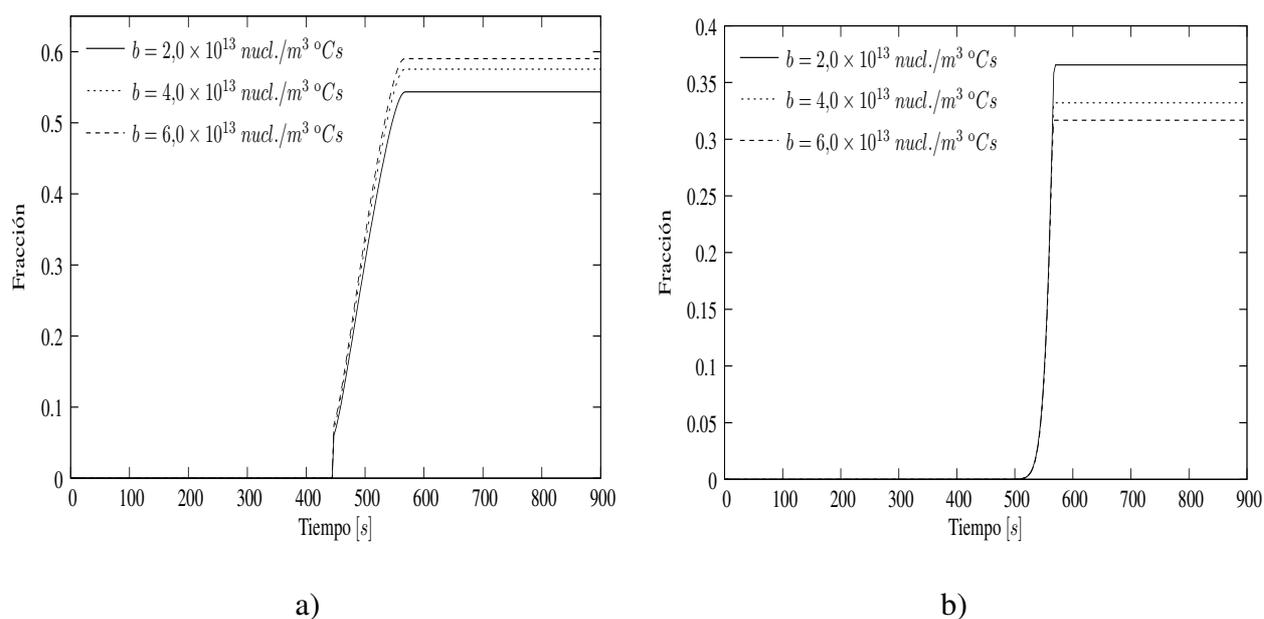


Figura 10: a - Evolución de la fracción de ferrita para distintos valores de b . b - Evolución de la fracción de perlita para distintos valores de b .

3.3. Variación de la temperatura metaestable

Además de la variación de la velocidad de enfriamiento, otra forma de reducir el tiempo disponible para el desarrollo de la fracción de ferrita sin la competencia del crecimiento de la perlita, es la disminución de la diferencia entre la temperatura de equilibrio estable y la temperatura de equilibrio metaestable (para una velocidad de enfriamiento constante). En las figuras (11) y (12), puede verse cómo cuando disminuye el intervalo de temperatura disminuye la fracción de ferrita y aumenta la de perlita. La variación de las fracciones de perlita y de ferrita según los diferentes valores de de la temperaturas metaestable pueden verse an la figura (13).

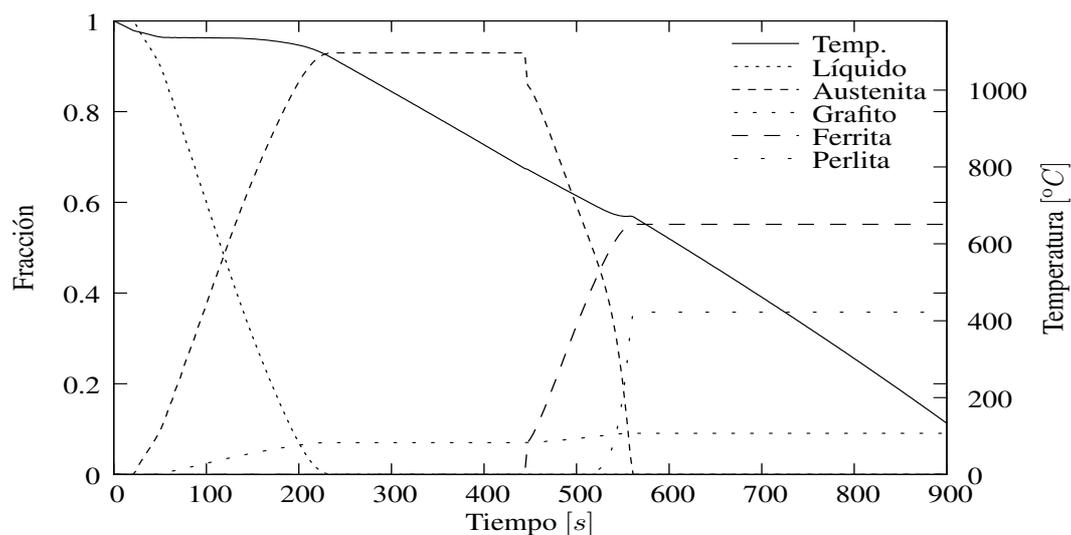


Figura 11: Evolución de la temperatura y de las fracciones para $T_{met} = 790$ °C .

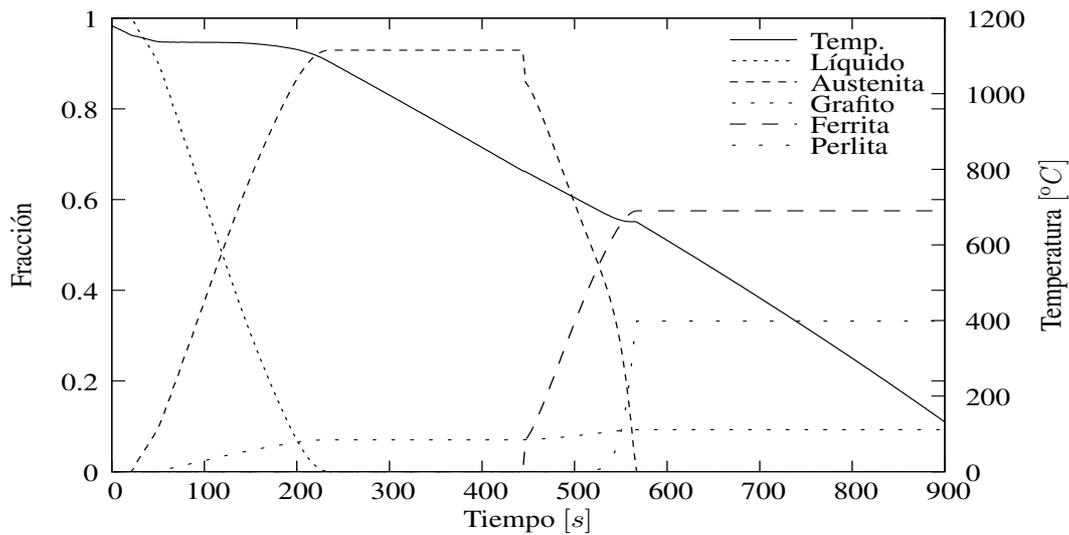


Figura 12: Evolución de la temperatura y de las fracciones para $T_{met} = 779 \text{ } ^\circ\text{C}$.

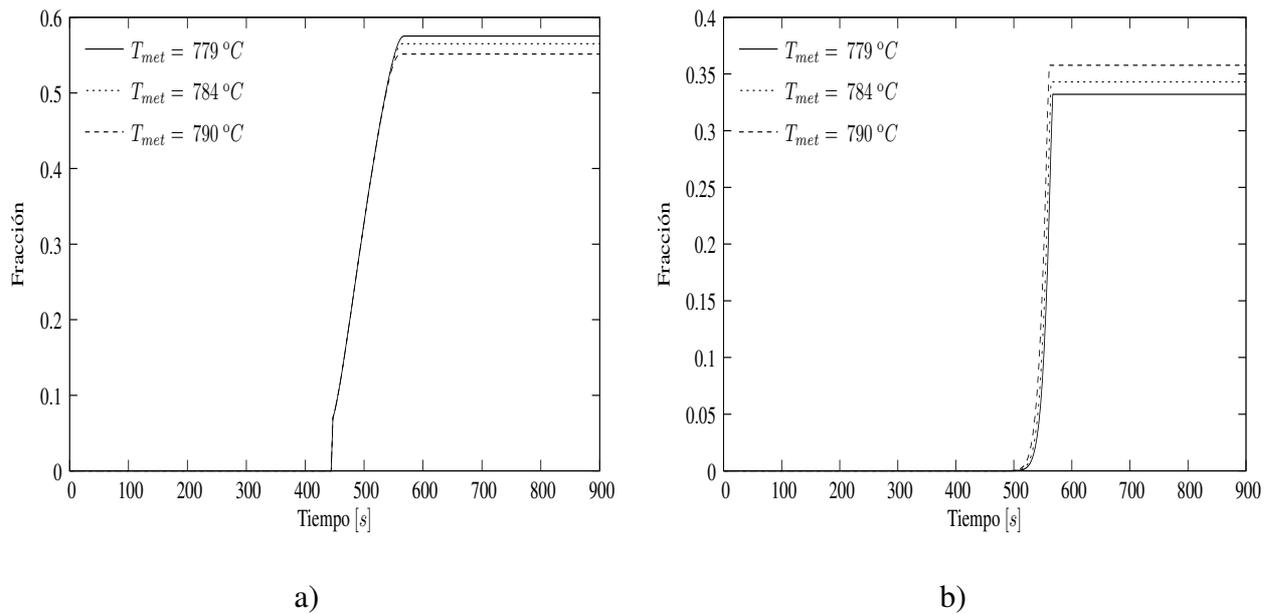


Figura 13: a - Evolución de la fracción de ferrita para los diferentes valores de T_{met} . b - Evolución de la fracción de perlita para los diferentes valores de T_{met} .

3.4. Variación del coeficiente de difusión del carbono en la ferrita

Algunos elementos aleantes pueden influir sobre la velocidad de difusión del carbono en la ferrita y, dado que el proceso de crecimiento de la fase ferrita es de carácter difusivo, tienen influencia en la velocidad de formación de esta fase, y, por lo tanto, en los porcentajes finales de ferrita y perlita. En las figuras (14) y (15) se muestra la evolución de la temperatura y de las fracciones para $D_C^\alpha = 2,2 \times 10^{-10} \text{ m}^2/\text{s}$ y $D_C^\alpha = 2,6 \times 10^{-10} \text{ m}^2/\text{s}$, respectivamente. En la figura (16), se puede observar que a mayores valores del coeficiente de difusión mayor fracción de ferrita.

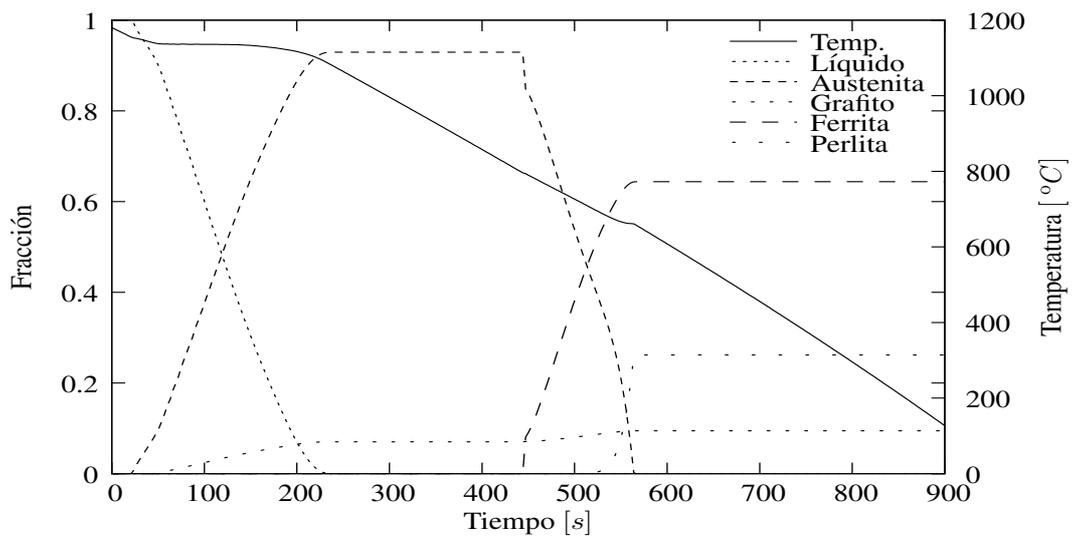


Figura 14: Evolución de la temperatura y de las fracciones para $D_{\alpha}^C = 2,2 \times 10^{-10} \text{ m}^2/\text{s}$.

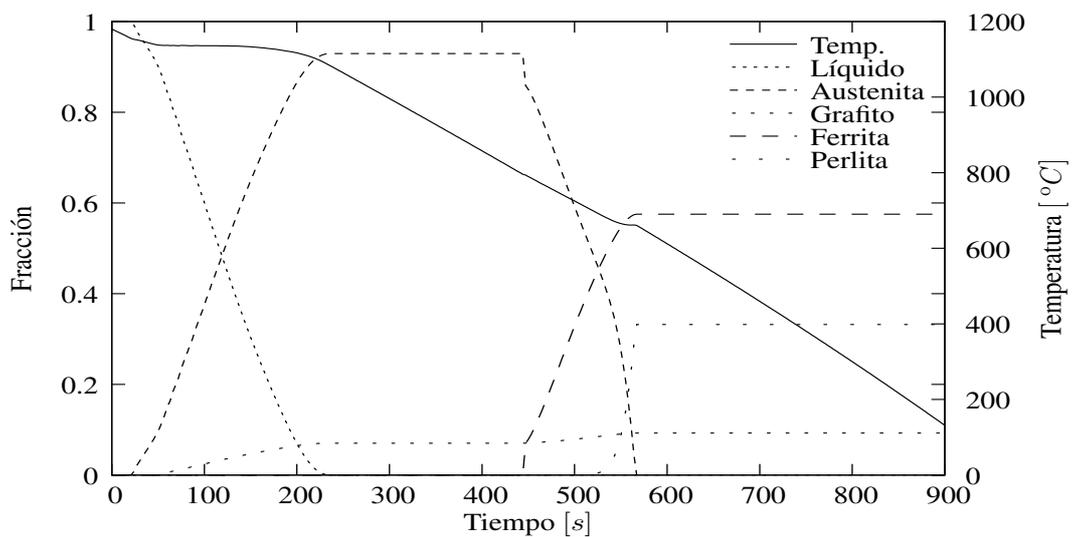


Figura 15: Evolución de la temperatura y de las fracciones para $D_{\alpha}^C = 2,6 \times 10^{-10} \text{ m}^2/\text{s}$.

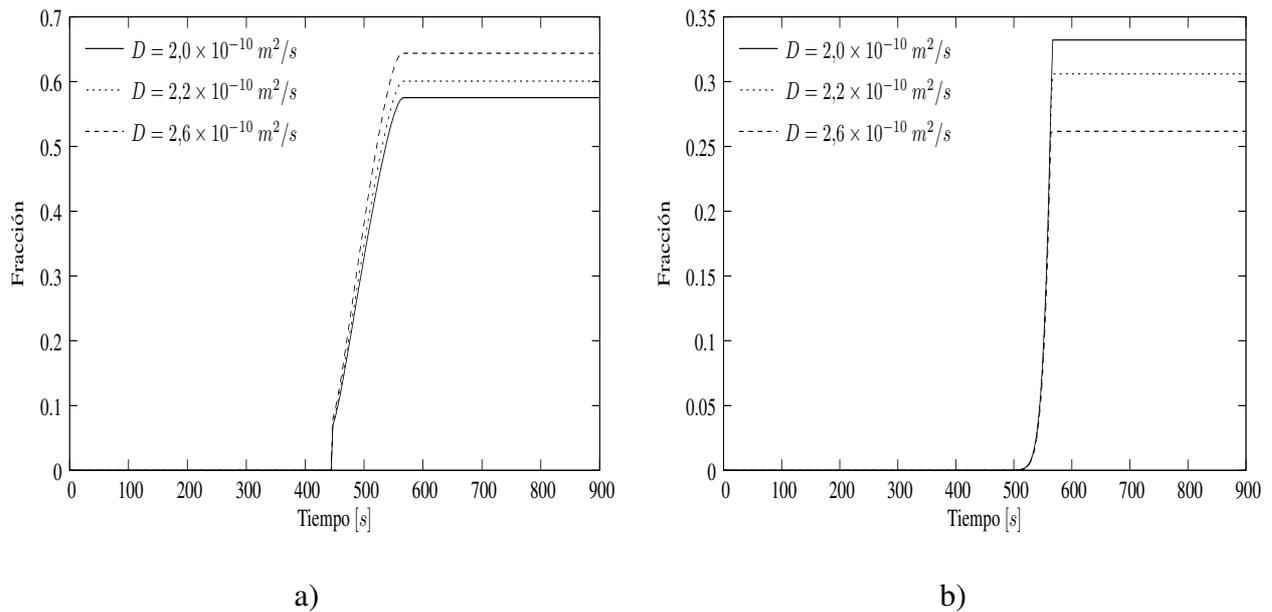


Figura 16: a - Evolución de la fracción de ferrita para los diferentes valores de D_{α}^C . b - Evolución de la fracción de perlita para los diferentes valores de D_{α}^C .

4. CONCLUSIONES

Se implementó un modelo que nos permite simular computacionalmente los cambios de fase que experimenta una fundición nodular de composición eutéctica durante su enfriamiento, desde la temperatura de colada hasta la temperatura ambiente. El modelo es capaz de predecir tanto la evolución de la temperatura como la evolución de las distintas fracciones microestructurales. Los resultados obtenidos, muestran que el modelo se comporta según lo esperado y acorde a lo reportado en las referencias (Venugopalan, 1990; Lacaze and Gerval, 1998). Si bien el modelo de cambio de fase eutectoide implementado es bastante general, es un punto de partida para el desarrollo de un modelo que tengan en cuenta otros factores que influyen en la cinética de las transformaciones de fase tales como, la nucleación continua de la ferrita y de la perlita, la interacción de granos (impingement) durante el crecimiento de la perlita y las microsegregaciones. Aún cuando los resultados obtenidos nos permiten predecir satisfactoriamente las variaciones globales de la fracción de perlita y ferrita frente a la modificación de algunos parámetros fundamentales de la transformación para un elemento unidimensional, se plantea como trabajo a futuro la aplicación del modelo presentado a casos de geometrías reales que consideren tanto la pieza como el molde.

REFERENCIAS

- Aagaard R., Hattel J., Schafer W., Svensson I., and Hansen P. Simulation vs. reality of an industrial ductile iron casting. *AFS Transactions*, 96-185:659–667, 1996.
- Boeri R. *The Solidification of Ductile Cast Iron*. Doctoral Thesis, University of British Columbia, Canada, 1989.
- Catalina A., Guo X., Stefanescu D., Chuzhoy L., and Pershing M. Prediction of room temperature microstructure and mechanical properties in gray iron casting. *AFS Transactions*, 00-72:247–257, 2000.
- Celentano D., Oñate E., and Oller S. A temperature-based formulation for finite element analysis of generalized phase-change problems. *International Journal for Numerical Methods in*

- Engineering*, 37:3441–3465, 1994.
- Dardati P. *Simulación Micromecánica de la Solidificación de la Fundición Dúctil*. Tesis Doctoral, Universidad Nacional de Córdoba, Argentina, 2005.
- Dardati P., Carazo F., Godoy L., and Celentano D. Simulación numérica multiescala del proceso de enfriamiento de la fundición nodular. *Mecánica Computacional*, XXVI:3512–3529, 2007.
- Dardati P., Godoy L., and Celentano D. Microstructural simulation of solidification process of spheroidal-graphite cast iron. *Journal of Applied Mechanics*, 73-(6):977–983, 2006.
- Guo X. and Stefanescu D. Solid phase transformation in ductile iron- a benchmark for computational simulation of microstructure. *AFS Transactions*, 97-81:533–543, 1997.
- Hillert M.H. The formation of pearlite. In *Decomposition of Austenite by Difussional Processes*. Interscience. N. Y., pages 197–237, 1962.
- Lacaze J. and Gerval V. Modeling of the eutectoid reaction spheroidal graphite fe-c-si alloys. *The Iron and Steels Institute of Japan International*, 38-7:714–722, 1998.
- Mehl R.F. The decomposition of austenite by nucleation and growth processes. *JISI*, 159:113–129, 1948.
- Munirajulu M., Dhindaw B.K., Biswas A., and Roy A. Modelling of eutectoid transformation in plain carbon steel. *The Iron and Steels Institute of Japan International*, 34-4:355–358, 1994.
- Pang H. and Stefanescu D. Stochastic modeling of dendritic and eutectic grain structure evolution during solidification. *Solidification Science and Processing*, pages 149–156, 1996.
- Porter D.A. and Easterling K.E. *Phase Transformations in Metals and Alloys*. Stanley Thornes, 2000.
- Reed Hill R.E. *Physical Metallurgy Principles*. D. Van Nostrand Company, 1979.
- Rivera G., Boeri R., and Sikora J. Influence of the solidification microstructure on the mechanical properties of ductile iron. *International Journal of Cast Metals Research*, 11-5:267–272, 1999.
- Shewmon P.G. *Transformations in Metals*. McGraw-Hill, 1969.
- Sikora J., Boeri R., and Rivera G. Characteristics of austenite in ductile iron: its influence on the microstructure and properties. *Proceedings of the International Conference on the Science of Casting and Solidification*, pages 321–329, 2001.
- Venugopalan D. A kinetic model of the $\gamma \rightarrow \alpha + gr$ eutectoid transformation in spheroidal graphite cast irons. *Metallurgical and Materials Transactions A*, 21-A:913–918, 1990.