

MODELADO COMPUTACIONAL DE LOS CAMBIOS DE FASE EN ESTADO SÓLIDO DURANTE EL ENFRIAMIENTO CONTINUO DE UNA FUNDICIÓN NODULAR

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

^aDpto. Ingeniería Mecánica y CIII, Universidad Tecnológica Nacional, FRC, Maestro M. López s/n, Ciudad Universitaria, Córdoba, Argentina, fcarazo@scdt.frc.utn.edu.ar, pdardati@industrial.frc.utn.edu.ar, <http://www.frc.utn.edu.ar>

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

^cDpto. Estructuras, Facultad de Ciencias Exactas Físicas y Naturales, Universidad Nacional de Córdoba, Avda. Vélez Sarsfield 1601, Córdoba, Argentina, lgodoy@com.uncor.edu, <http://www.efn.unc.edu.ar>

Palabras Clave: fundición nodular, grafito, ferrita, perlita, elemento finito.

Resumen. En este trabajo se presenta un modelo computacional de las transformaciones de fase que ocurren durante el enfriamiento continuo de una fundición nodular de composición ligeramente hipereutéctica. Las transformaciones modeladas son, el crecimiento de los nódulos de grafito desde el final de la solidificación y hasta alcanzar la temperatura eutectoide estable, y las transformaciones eutectoide estable y metaestable. Entre la temperatura eutéctica y eutectoide estable, el crecimiento de los nódulos de grafito es función del flujo de carbono desde la austenita hacia los nódulos. En la transformación eutectoide estable la nucleación de la ferrita se asume instantánea sobre los nódulos de grafito y su velocidad de crecimiento depende de la difusión del carbono desde la austenita a través de los ferrita hacia los nódulos de grafito. En la interfase ferrita/austenita se asume equilibrio, y en la interfase grafito/ferrita se considera que ocurre una reacción interfacial la cual modifica la concentración de equilibrio de carbono de la ferrita en dicha interfase y, junto con ella, su velocidad de crecimiento. La nucleación de las colonias de perlita se modela a partir de una ley continua y su velocidad de crecimiento depende de forma indirecta del espaciamiento entre las láminas de cementita y ferrita, y de las concentraciones de equilibrio de carbono de la austenita en la interfase austenita/cementita y austenita/ferrita. Ambos cambios de fase eutectoide se asumen como dos procesos competitivos. El problema de transferencia de calor es resuelto por el método de los elementos finitos y el acoplamiento del campo térmico y metalúrgico se realiza por el método del calor latente. Por último, los resultados numéricos son validados con los resultados obtenidos en los ensayos llevados a cabo con probeteros para determinación de CE de sección circular.

1. INTRODUCCIÓN

Los progresos realizados en los últimos años en el modelado computacional del enfriamiento de la fundición nodular residen en la capacidad para predecir características microestructurales y, junto con ellas, las propiedades de servicio de una pieza fundida, permitiendo así el reemplazo de costosas pruebas experimentales por ensayos virtuales llevados a cabo en el computador. Actualmente, los modelos computacionales utilizados para predecir la microestructura obtenida al final del enfriamiento de una pieza colada o tratada térmicamente, resuelven el problema a dos escalas diferentes pero interrelacionadas entre sí. A escala macro, y dependiendo de la complejidad geométrica de la pieza y de su volumen, las leyes matemáticas de conservación de masa, energía, cantidad de movimiento y especies permiten conocer los campos de temperatura, velocidad, presión y composición; en tanto modelos a escala micro permiten determinar variables propias de esta escala, imposibles de obtener con modelos planteados solamente a escala macroscópica, tales como: fracciones de fase, espaciamiento entre las dendritas primarias y secundarias, tamaño de grano y espaciamiento interlaminar, entre otras. En la Figura 1 se ve la microestructura típica de una fundición nodular en bruto de colada, en ésta se observan los nódulos de grafito rodeados por la ferrita formando el característico “ojo de buey” de estas aleaciones ternarias Fe-C-Si, estando el resto de la matriz constituido por el microconstituyente conocido como perlita. La importancia de llevar a cabo el estudio completo del enfriamiento de la fundición nodular reside en que, aún cuando las características de su microestructura se terminan de definir durante las transformaciones que ocurren en estado sólido, el desarrollo de los cambios de fase eutectoide estable y metaestable dependen de las características que la microestructura tiene al final de la solidificación; por ejemplo, un elevado número de nódulos de grafito favorece la transformación de la austenita según el sistema estable Fe-C-Si, mientras que granos de austenita pequeños y microsegregaciones de elementos aleantes, tales como Cu, Mn o Sn, favorecen la transformación de la austenita según el sistema metaestable Fe-C-Si. Según nuestro conocimiento, la mayoría de los trabajos que tratan el modelado de las transformaciones de fase de la fundición nodular, están dedicados al estudio de la solidificación y de sus tratamientos térmicos, siendo menor la cantidad de trabajos dedicados al modelado del enfriamiento completo desde que la aleación es colada hasta alcanzar la temperatura ambiente. De las teorías que explican el proceso de solidificación de la fundición nodular, las dos más importantes son: la uninodular y la plurinodular (Boeri, 1989; Rivera et al., 1999; Sikora et al., 2001). La teoría uninodular postula que los nódulos de grafito nuclean en el líquido y la austenita crece formando una envoltura esférica alrededor de las esferas de grafito (eutético no divorciado), por otro lado, la teoría plurinodular plantea que ambas fases, el grafito y la austenita, nuclean independientemente una de la otra en el líquido (eutético divorciado), y la austenita, durante su crecimiento dendrítico, alcanza y envuelve a los nódulos de grafito formando el característico grano eutético. La mayoría de los trabajos dedicados al modelado de la solidificación de la fundición nodular adoptan modelos simplificados basados en la teoría uninodular (Aagaard et al., 1996; Banerjee y Stefanescu, 1991; Wenzhen y Baicheng, 1996; Frás et al., 1997; Charbon y Rappaz, 1997; Liu y Elliot, 1998, 1999; Chang et al., 1999; Ohnaka, 1999; Wessén y Svensson, 1996). No obstante esto y conscientes de que los modelos numéricos de la solidificación de la fundición nodular deben incluir la nucleación independiente de la austenita y el grafito en el líquido, el crecimiento independiente y dendrítico equiaxial de la austenita y esférico de los nódulos de grafito en el líquido, algunos de los autores de este artículo desarrollaron un nuevo modelo numérico de la solidificación de una fundición nodular de composición eutética basado en la teoría plurinodular (Dardati, 2005; Dardati et al., 2006). Las principales

características de la solidificación de esta aleación que el modelo permite conocer son: la evolución en función del tiempo de las fracciones líquida, de grafito y de austenita además de la cantidad de silicio en el líquido, el tamaño del grano de austenita y el tamaño de los nódulos de grafito y su distribución. En un último trabajo publicado por los mismos autores, se han dado los primeros pasos en la validación experimental de los resultados numéricos obtenidos hasta el presente (Dardati et al., 2009).

Por otro lado, entre los principales trabajos dedicados al modelado de las transformaciones de fase en estado sólido en la fundición nodular, Venugopalan (1990) estudia la transformación de la austenita según un sistema estable Fe-C-Si para una serie de procesos isotérmicos, asumiendo equilibrio en las interfases grafito/ferrita y ferrita/austenita, y modelando la nucleación de la ferrita como un fenómeno que ocurre instantáneamente en la interfase grafito/austenita luego de un tiempo de incubación asociado a limitaciones en la cinética de la nucleación. En el instante de la nucleación, los nódulos de grafito son envueltos por una capa de ferrita cuyo espesor es el que corresponde a una fracción volumétrica del elemento de volumen representativo (EVR) del 1%. Para el crecimiento de la ferrita y del grafito considera la difusión del carbono desde la interfase ferrita/austenita hacia los nódulos de grafito y hacia la austenita no transformada. Chang et al. (1992) estudian el enfriamiento de una fundición nodular de composición hipereutéctica determinando, a partir de un modelo computacional, algunas características microestructurales tales como fracciones de fase, espaciado interlamilar y dimensiones de grano. Al cambio de fase eutéctico lo modelan según la teoría uninodular. A la nucleación de la ferrita y de la perlita no la modelan. La velocidad de crecimiento de la ferrita es función de la difusión del carbono desde la austenita hacia los nódulos de grafito. Para el cálculo de la fracción de perlita aplican la regla de aditividad para procesos no isotérmicos a la fórmula de Johnson-Mehl-Avrami. De las referencias estudiadas, éste es el único trabajo en el cual se lleva a cabo un estudio completo del enfriamiento de una fundición nodular de composición eutéctica, no considerando el empobrecimiento en carbono de la austenita entre la transformación eutéctica y la eutectoide estable, y modelando la transformación eutectoide metaestable según una ley macroscópica, la cual sólo permite conocer la fracción de perlita transformada pero no sus características microestructurales. Wessén y Svensson (1996) simulan la transformación eutectoide estable de una fundición nodular de composición eutéctica considerando tres pasos en serie. En un primer paso la ferrita nuclea a una temperatura 20 °C más baja que la temperatura eutectoide estable y va envolviendo los nódulos de grafito en un proceso controlado por la difusión del carbono en la austenita. El espesor de las envolturas de ferrita se mantiene constante hasta que los nódulos han sido cubiertos por completo. En un segundo paso asumen que el crecimiento de la ferrita es controlado por una reacción interfacial desarrollada en la interfase grafito/ferrita cuya velocidad es inversamente proporcional al radio del nódulo de grafito. Finalmente, en un tercer paso modelan el crecimiento de las envolturas de ferrita como un proceso controlado por la difusión del carbono hacia los nódulos de grafito a través de la ferrita. Lacaze y Gerval (1998) estudian la transformación eutectoide estable y metaestable de una fundición de grafito esferoidal de composición eutéctica considerando ambos cambios de fase como dos procesos competitivos. El cambio de fase eutéctico no es modelado por lo que para la determinación del tamaño de los nódulos de grafito al comienzo de la transformación eutectoide parten de mediciones experimentales y, utilizando leyes empíricas, calculan la densidad volumétrica de nódulos de grafito y el tamaño del elemento de volumen representativo continuando el proceso según la teoría uninodular. Asumen equilibrio en la interfase ferrita/austenita mientras que en la interfase grafito/ferrita consideran que ocurre una reacción interfacial en función de la cual calculan la concentración de carbono en dicha interfase. A la velocidad de crecimiento de los nódulos

de grafito y de la ferrita la calculan en función de la difusión del carbono desde las austenita hacia los nódulos de grafito. A la nucleación de las colonias de perlita la modelan como un proceso continuo proporcional al sobreenfriamiento y a la velocidad de enfriamiento, el cual finaliza cuando la densidad de colonias de perlita alcanza la densidad de nódulos de grafito. Para sobreenfriamientos menores a 100 °C la velocidad de crecimiento de las colonias de perlita es proporcional al cubo del sobreenfriamiento y a un coeficiente que depende de los parámetros termodinámicos de la aleación. Chang et al. (1999) estudian el cambio de fase eutectoide estable en una fundición de grafito esferoidal durante un proceso isotérmico. Consideran la nucleación de la ferrita como un fenómeno instantáneo que ocurre a una temperatura determinada experimentalmente. Para el crecimiento del grafito consideran una fórmula aproximada de balance de masa en la interfase grafito/ferrita.

En este trabajo se simula el enfriamiento completo de una fundición nodular de composición ligeramente hipereutéctica desde la temperatura de colada hasta alcanzar la temperatura ambiente, prestando especial atención a los cambios de fase en estado sólido. Los resultados numéricos se comparan con los resultados experimentales obtenidos con probeteros para determinación de carbono equivalente de sección circular. En la sección dos se presentan las principales características de la formulación numérica utilizada en la resolución del problema a escala macro y microscópica. En la sección tres se describen los modelos microestructurales implementados. En la sección cuatro y cinco, se presentan los principales aspectos de los procedimientos experimentales y numéricos desarrollados. En la sección seis se comparan y analizan los resultados numéricos y experimentales y, por último, en la sección siete se elaboran las conclusiones que se desprenden de este trabajo.

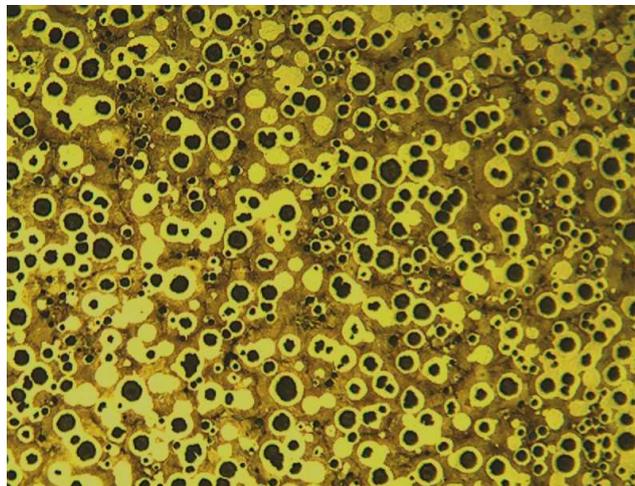


Figura 1: Microestructura típica de una fundición nodular semiperlítica.

2. FORMULACIÓN DEL PROBLEMA

El problema del enfriamiento de una aleación con cambio de fase, puede ser considerado como el resultado del acoplamiento de dos problemas diferentes pero relacionados entre sí; por un lado la transferencia de energía, y por otro, las transformaciones de fase. Un adecuado modelado del enfriamiento de una aleación deberá contemplar ambos fenómenos y su acoplamiento (Figura 2).

2.1. Problema Térmico

La transferencia de calor durante el enfriamiento de una pieza fundida puede modelarse, a escala macroscópica, mediante la ecuación de la energía formulada a partir del planteamiento de la conservación de la energía en el sistema estudiado. Para el caso más genérico, la velocidad de cambio de energía en el sistema será igual a la suma de la velocidad del intercambio de energía debido a procesos conductivos, convectivos y radiativos, al trabajo mecánico debido a los cambios de volumen, al movimiento del fluido y al calor generado ó absorbido por reacciones químicas y cambios de fase, en este trabajo, las hipótesis planteadas en la formulación macroscópica del problema son: la pieza y el molde se consideran medios isotrópicos, la energía generada ó absorbida debido al trabajo mecánico y al movimiento del fluido son despreciables, los efectos de separación entre el molde y el metal durante el enfriamiento son considerados mediante coeficientes de transferencia de calor apropiados en la interfaz molde/metal y, finalmente, la generación de energía tiene su origen en los cambios de fase que ocurren durante el enfriamiento. Teniendo en cuenta las hipótesis planteadas, la ecuación de la energía resulta:

$$\frac{\partial(c\rho T)}{\partial t} = \nabla(K\nabla T) + \dot{Q} \quad (1)$$

donde: t es el tiempo, c es el calor específico, ρ la densidad, T la temperatura, K la conductividad térmica y \dot{Q} la velocidad de generación de calor debido a los cambios de fase.

2.1.1. Condiciones de contorno

Las condiciones de contorno impuestas en las interfases pieza/molde y molde/ambiente, responden a una ley del tipo Newton:

$$q = h(T - T_f) \quad (2)$$

donde: q es el flujo térmico, h el coeficiente de conductancia en la interfaz pieza/molde y de convección en la interfaz molde/ambiente, T la temperatura en uno de los medios que delimita la interfase y T_f la del otro.

2.1.2. Condiciones iniciales

El contacto de una aleación fundida con las paredes de un molde frío origina gradientes térmicos como consecuencia de las diferentes temperaturas que se presentan entre los puntos calientes y fríos de la aleación colada, debido al calor absorbido por el molde. La importancia de estos gradientes térmicos y su influencia en los fenómenos convectivos, varían según el tamaño y la geometría de la pieza, siendo importantes en piezas de gran tamaño y de geometrías complejas, pudiendo llegar a despreciarse en piezas pequeñas y de geometría simple, de aquí que las condiciones iniciales varían según el caso de estudio.

2.1.3. Generación de calor debido a los cambios de fase

Los métodos empleados para incluir la generación de calor latente debido a los cambios de fase en la ecuación de la energía (ecuación 1) son: el método de recuperación de temperatura, el método del calor específico, el método de la entalpía y el método del calor latente. Los tres primeros no permiten tener en cuenta las características de las transformaciones de fase ni captar fenómenos tales como la recalcancia. En este trabajo se implementa el método del

calor latente, según el cual, las velocidades de generación de calor debido a los cambios de fase están dadas por:

$$\dot{Q} = L\rho \frac{df}{dt} \quad (3)$$

donde: f es la fracción de fase transformada, L es el calor latente asociado al cambio de fase y ρ es la densidad de la fase considerada.

2.2. Problema Metalúrgico

Los modelos de cambio de fase implementados en este trabajo se basan en la técnica del EVR, en los cuales y a diferencia de los modelos continuos formulados a través de la ley de mezcla, la cantidad correspondiente a la fracción de fase transformada presente en la ecuación 1 no tiene significado físico a escala del modelo continuo. Las cantidades de fase que se calculan son continuas en una fase pero discontinuas en distintos puntos del dominio, siendo estas discontinuidades tratadas mediante leyes fenomenológicas que describen las cantidades y características de cada fase promediadas en cada volumen representativo (Stefanescu, 2008).

2.3. Acoplamiento Termo-Metalúrgico

En la Figura 2 se muestran en un esquema las escalas de análisis de los problemas térmico y metalúrgico; en la misma figura puede verse un EVR asociado a cada punto de Gauss en el cual se promedian la fracción de fase y sus características. La ventaja en los tiempos y requerimientos de cálculo hacen que la técnica del EVR resulte útil aún cuando en el promediado de las propiedades exista pérdida de información a escala microscópica (Stefanescu, 2005, 2008).

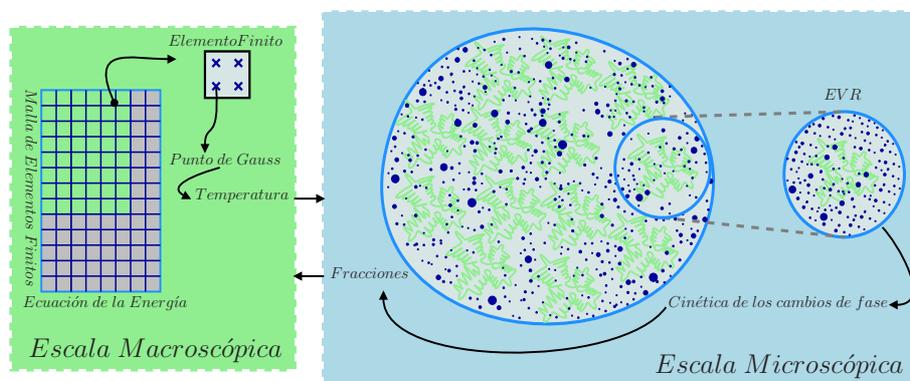


Figura 2: Relación entre el campo térmico y microestructural en un problema de cambio de fase resuelto por el método de los elementos finitos.

3. MODELOS MICROESTRUCTURALES

La velocidad de generación de calor tenida en cuenta en este trabajo (ecuación 3), es función de la fracción de fase transformada, y esta a su vez depende de la cinética de los cambios de fase líquido/sólido (eutético) y sólido/sólido (eutectoide estable y metaestable), teniendo en cuenta lo anteriormente dicho, la fracción de fase transformada está dada por:

$$f = f_{tic} + f_{oid} \quad (4)$$

donde f_{tic} es la fracción de fase sólida transformada durante el cambio de fase eutéctico, a la cual la calculamos como:

$$f_{tic} = f_{\gamma} + f_{gr} \quad (5)$$

donde f_γ y f_{gr} son las fracciones volumétricas de austenita y grafito respectivamente. Por otro lado, f_{oid} presente en la expresión 4, representa la fracción de fase transformada durante las transformaciones eutectoide estable y metaestable, a la cual la expresamos como:

$$f_{oid} = f_\alpha + f_{gr} + f_{(\alpha+Fe_3C)} \quad (6)$$

donde f_α y $f_{(\alpha+Fe_3C)}$ son las fracciones volumétricas de ferrita y perlita transformadas durante los cambios de fase eutectoide estable y metaestable respectivamente.

La evolución de las variables que intervienen en los cálculos de 5 y 6 se detallan en los siguientes apartados.

3.1. Cambio de fase líquido-sólido

El modelo de solidificación implementado en este trabajo se basa en la teoría plurinodular (Dardati, 2005; Dardati et al., 2006).

3.1.1. Leyes de nucleación

El modelo considera que los nódulos de grafito y los granos de austenita nuclean en el líquido independientemente unos de otros, según las ecuaciones 7 y 8 respectivamente. La nucleación del grafito se asume continua, iniciándose cuando la temperatura de la aleación es menor que la temperatura eutéctica; la nucleación se detiene si se produce recalcancia y se reanuda si la temperatura toma un valor inferior a la menor temperatura alcanzada desde el comienzo del proceso y aún no ha finalizado la solidificación. La nucleación de la austenita es instantánea y ocurre cuando la temperatura alcanza el valor eutéctico; el tamaño del grano final de dicha fase queda determinado por el número de granos de austenita que nuclean.

$$\frac{\partial N_{gr}}{\partial t} = b\Delta T e^{-c/\Delta T} (1 - f_{tic}) \quad (7)$$

$$N_\gamma = \frac{dT}{dt} \quad (8)$$

En la ecuación 7, b y c son coeficientes variables que varían en función de la composición y tratamiento del líquido, N_{gr} representa la densidad de nódulos de grafito, ΔT el sobreenfriamiento del líquido con respecto a la temperatura eutéctica y f_{tic} la fracción eutéctica.

En la ecuación 8, N_γ es la densidad de granos de austenita y A un parámetro que depende del tratamiento del líquido. El modelo considera dos zonas de nucleación para el grafito: el líquido interdendrítico (zona 2) y el líquido intergranular (zona 3). Ver Figura 3.

3.1.2. Crecimiento de los nódulos de grafito

El modelo considera el volumen del grano de austenita dividido en tres zonas (Figura 3), los nódulos envueltos por la austenita (zona 1) no crecen más, mientras que la velocidad de crecimiento de los nódulos presentes en las zonas 2 y 3 está dada por las ecuaciones 9 y 10:

$$\frac{dR_{gr}}{dt} = \frac{D_C^l (C^{l/\gamma'} - C^{l/gr}) \rho_l}{R_{gr} (100\rho_{gr} - C^{l/gr} \rho_l)} \quad (9)$$

$$\frac{dR_{gr}}{dt} = \frac{D_C^l (C'_{pro} - C^{l/gr}) \rho_l}{R_{gr} (100\rho_{gr} - C^{l/gr} \rho_l)} \quad (10)$$

donde: ρ_l y ρ_{gr} son las densidades del líquido y del grafito respectivamente, D_C^l es el coeficiente de difusión del carbono en el líquido, R_{gr} es el radio del nódulo de grafito y $C^{l/\gamma}$ y $C^{l/gr}$ son las concentraciones de equilibrio de carbono del líquido en contacto con la austenita y con el grafito respectivamente. La única diferencia entre las ecuaciones 9 y 10 es la concentración de carbono del líquido que rodea a los nódulos de grafito; siendo para los nódulos de la zona 2 líquido interdendrítico de concentración $C^{l/\gamma'}$, y para los nódulos de la zona 3 el líquido intergranular de concentración C'_{pro} . En ambas concentraciones la comilla indica que el valor corresponde al calculado después del crecimiento de la austenita.

3.1.3. Crecimiento del grano de austenita

En el cálculo del crecimiento de la fracción de austenita intervienen las ecuaciones 11 (Pang y Stefanescu, 1996) y 12, las cuales representan la velocidad de crecimiento de la punta de las dendritas principales y la velocidad de crecimiento del radio de la zona esférica 1 (R_n) (Figura 3) respectivamente, cuyo volumen es igual a la suma del volumen de la austenita más el de los nódulos que ya han sido rodeados por dicha fase.

$$\frac{dR_g}{dt} = \frac{kD_C^l m C_0}{2\pi^2 \Gamma(k-1)} \left(\frac{C^{l/\gamma} - C_{\infty g}}{C_0} \right)^2 \quad (11)$$

$$\frac{dR_n}{dt} = \frac{3D_C^l R_G^2 \left. \frac{\partial C}{\partial r} \right|_{R_G} + \frac{dC^{l/\gamma}}{dt} (R_G^3 - R_n^3)}{3C^{l/\gamma} (1-k) R_n^2} \quad (12)$$

En la ecuación 11, R_G corresponde al radio de la superficie esférica determinada por las puntas de las dendritas principales del grano equiaxial de austenita (Figura 3), m es la pendiente de la línea de líquidus de la austenita T_{AL} , Γ es el coeficiente de Gibbs-Thompson, C_0 es la concentración inicial de carbono, k es el coeficiente de partición del carbono, $C_{\infty g}$ es la concentración de carbono en el líquido intergranular fuera de la zona delimitada por las puntas de las dendritas de austenita y después del crecimiento del grafito, en tanto en la ecuación 12, R_n es el radio correspondiente a la zona 1 (Figura 3). Una explicación detallada del modelo de transformación eutéctica puede verse en (Dardati, 2005; Dardati et al., 2006).

3.2. Crecimiento de los nódulos de grafito entre las temperaturas eutéctica y eutectoide estable

En la Figura 4 se muestra un esquema del diagrama Fe-C-Si en el cual se señala una temperatura intermedia entre la eutéctica y la eutectoide estable T_{tic}^* (a), también puede verse el perfil de concentración de carbono (b) y el EVR correspondiente a dicho intervalo de temperatura (c). Una vez que la solidificación ha terminado, y a medida que la temperatura de la aleación disminuye, la solubilidad del carbono en la austenita disminuye (línea A-B del diagrama de la Figura 4), el carbono expulsado de la austenita difunde hacia los nódulos de grafito existentes que aumentan su tamaño. Asumiendo que la concentración de carbono en la austenita en contacto con el grafito es la de equilibrio, la diferencia entre esta concentración y la de la austenita alejada de la interfase grafito/austenita es la fuerza impulsora para que el carbono difunda hacia los nódulos de grafito (Figura 4). Considerando la difusión del carbono a través de la austenita y hacia los nódulos de grafito como un proceso estacionario, la velocidad de crecimiento de los

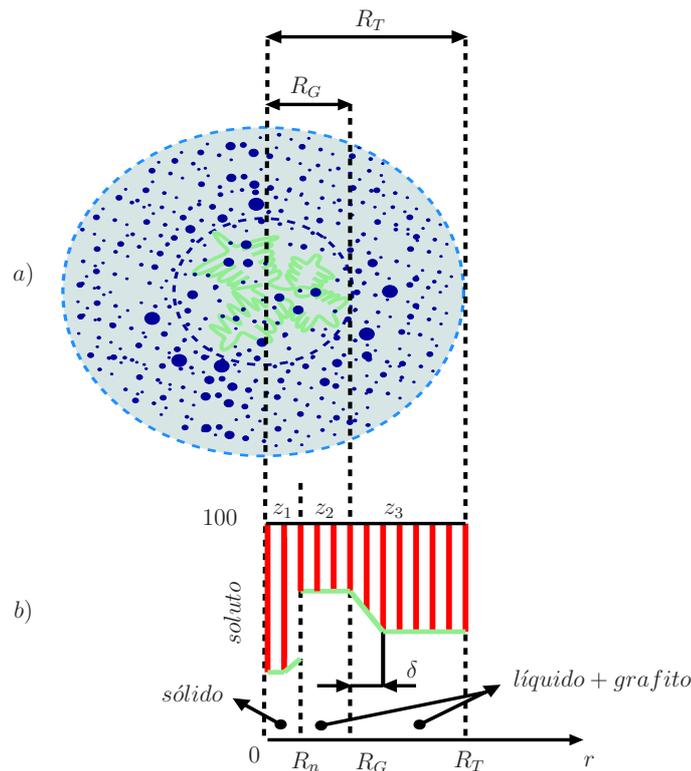


Figura 3: a)- Esquema de un modelo de solidificación dendrítica equiaxial para una fundición nodular eutéctica. b)- Perfil de concentración de carbono.

nódulos de grafito entre la temperatura eutéctica y la eutectoide estable es:

$$\frac{dR_{gr}}{dt} = D_C^\gamma \frac{R_T}{R_{gr}(R_T - R_{gr})} \frac{\rho_\gamma}{\rho_{gr}} \frac{(C^{\gamma_{tic}} - C^{\gamma/gr})}{(100/\rho_\gamma - C^{\gamma/gr})} \quad (13)$$

donde: ρ_γ es la densidad de la austenita, D_C^γ es el coeficiente de difusión del carbono en la austenita, $C^{\gamma_{tic}}$ es la concentración de carbono en la austenita al final de la solidificación y $C^{\gamma/gr}$ es la concentración de equilibrio de carbono en la interfase austenita/grafito.

3.3. Transformación eutectoide

Las transformaciones eutectoide modeladas son las transformaciones eutectoide estable y metaestable, considerando ambos cambios de fase como dos procesos competitivos.

3.3.1. Cambio de fase eutectoide estable

A temperaturas inferiores al punto eutectoide, la austenita se transforma, según el sistema estable Fe-C-Si, en ferrita y grafito (Figura 5). La fase estable del hierro a estas temperaturas, la ferrita, nuclea sobre los nódulos de grafito y su velocidad de crecimiento es función de la difusión del carbono desde la austenita, tanto hacia los nódulos de grafito a través de las envolturas de ferrita, como hacia el volumen de la austenita alejada de la interfase ferrita/austenita. Los gradientes de concentración de carbono que impulsan su difusión durante el crecimiento de la ferrita corresponden, por un lado, a la diferencia de la concentración de carbono en la ferrita en las interfaces grafito/ferrita y austenita/ferrita, y por otro, a la diferencia entre las concentraciones de equilibrio de carbono de la interfase ferrita/austenita y del volumen de la austenita

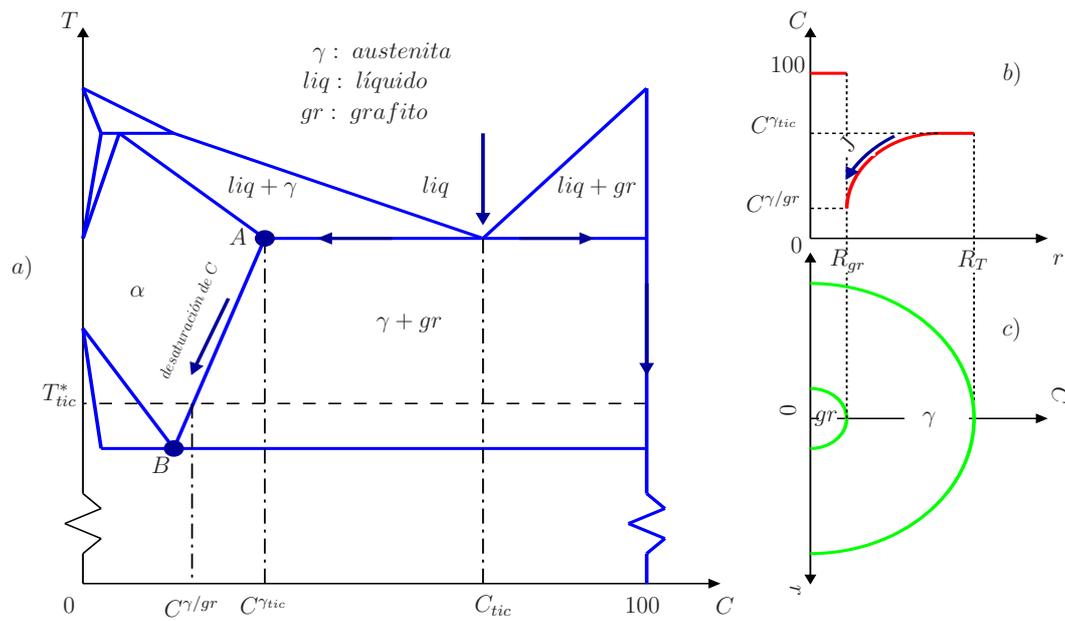


Figura 4: a)- Esquema de una parte del diagrama Fe-C-Si con las composiciones de interés para una temperatura $T_{tic} < T_{tic}^* < T_{oid}$. b) - Perfil de concentraciones de carbono. c) - EVR.

alejada de dicha interfase (Figura 5). En este trabajo se asume que al alcanzar la temperatura eutectoide estable, cada nódulo de grafito es rodeado por una envoltura esférica de ferrita cuyo radio es 1 % mayor al radio del nódulo de grafito respectivo. El crecimiento de las envolturas esféricas de ferrita tiene su origen en el empobrecimiento en carbono de la austenita provocado por el carbono que difunde hacia los nódulos de grafito y hacia la austenita alejada de la interfase grafito/austenita. Planteando el equilibrio de masa en la interfase ferrita/austenita se obtiene:

$$\rho_{\alpha}(C^{\gamma/\alpha} - C^{\alpha/\gamma}) \frac{dR_{\alpha}}{dt} = \rho_{\alpha} D_C^{\alpha} \left. \frac{\partial C^{\alpha}}{\partial r} \right|_{r=R_{\alpha}} - \rho_{\gamma} D_C^{\gamma} \left. \frac{\partial C^{\gamma}}{\partial r} \right|_{r=R_{\alpha}} \quad (14)$$

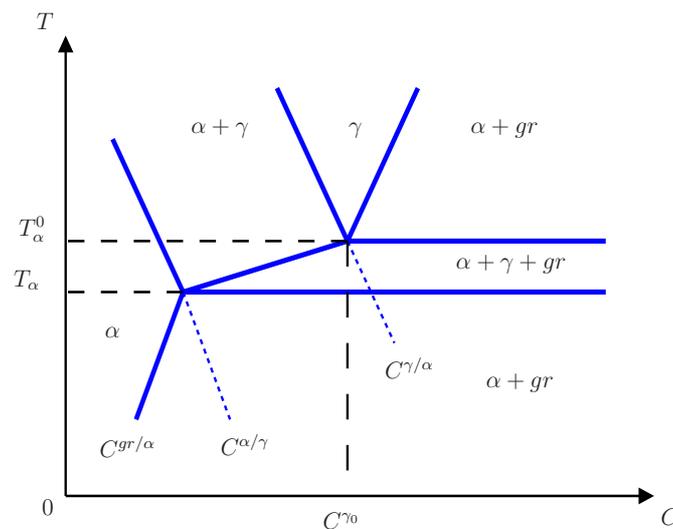


Figura 5: Esquema de una parte del diagrama estable FE-C-Si

donde: D_C^α es el coeficiente de difusión del carbono en la ferrita, $C^{\gamma/\alpha}$ y $C^{\alpha/\gamma}$ son las concentraciones de equilibrio de carbono en la austenita y en la ferrita en la interfase austenita/ferrita respectivamente y R_α es el radio de la envoltura de ferrita que rodea al nódulo de grafito.

Por otro lado, el crecimiento de los nódulos de grafito es función del flujo de carbono que difunde desde la interfase ferrita/austenita hacia los nódulos de grafito a través de las envolturas de ferrita; planteando el equilibrio de masa en la interfase ferrita/grafito se obtiene:

$$\rho_{gr}(100 - C^{\alpha/gr}) \frac{dR_{gr}}{dt} = \rho_\alpha D_C^\alpha \left. \frac{\partial C^\alpha}{\partial r} \right|_{r=R_{gr}} \quad (15)$$

donde $C^{\alpha/gr}$ es la concentración de equilibrio de carbono en la ferrita en la interfase ferrita/grafito.

La velocidad de crecimiento de las envolturas esféricas de ferrita y de los nódulos de grafito se obtienen integrando las ecuaciones 14 y 15; si el paso temporal usado en la integración de estas ecuaciones es pequeño, puede considerarse que el perfil de concentración de carbono a través de las envolturas de ferrita responde a una ley del tipo:

$$C^\alpha = a + \frac{b}{r} \quad (16)$$

las constantes a y b presentes en la ecuación 16 se calculan a partir de los valores de las concentraciones de carbono en las interfases grafito/ferrita y ferrita/austenita; derivando 16 y reemplazando estas concentraciones en la expresión resultante, los gradientes de concentración de carbono en las interfases de la ferrita con el grafito y la austenita, están dados por:

$$\left. \frac{\partial C^\alpha}{\partial r} \right|_{r=R_{gr}} = \frac{(C^{\alpha/\gamma} - C^{\alpha/gr}) R_\alpha}{R_{gr}(R_\alpha - R_{gr})} \quad (17)$$

$$\left. \frac{\partial C^\alpha}{\partial r} \right|_{r=R_\alpha} = \frac{(C^{\alpha/\gamma} - C^{\alpha/gr}) R_{gr}}{R_\alpha(R_\alpha - R_{gr})} \quad (18)$$

En tanto el gradiente de concentración de carbono en la austenita en la interfase austenita/ferrita es:

$$\left. \frac{\partial C^\gamma}{\partial r} \right|_{r=R_\alpha} = \frac{(C_{oid}^{\gamma 0} - C^{\gamma/\alpha})}{R_\alpha} \quad (19)$$

donde: $C_{oid}^{\gamma 0}$ es la concentración de carbono en la austenita alejada de la interfase austenita/ferrita. Asumiendo el crecimiento de los nódulos de grafito como una función de una reacción interfacial en la interfase ferrita/grafito (Lacaze y Gerval, 1998; Wessén y Svensson, 1996), y considerando que en la interfase ferrita/austenita existe equilibrio, la diferencia entre la concentración de carbono en la interfase grafito/ferrita y de equilibrio en la interfase ferrita/austenita, es la diferencia de concentración de carbono que provee la fuerza impulsora necesaria para que los átomos de carbono difundan desde la interfase ferrita/austenita hacia la interfase ferrita/grafito. Siguiendo el razonamiento propuesto por Lacaze y Gerval (1998), es decir, asumiendo que el flujo de átomos de carbono correspondiente al primer miembro de la ecuación 15 se lleva a cabo en dos pasos en serie, en el primer paso, se considera que el flujo de carbono es controlado por una reacción interfacial en la interfase ferrita/grafito dado por la siguiente expresión:

$$\phi = -k^\alpha \rho_\alpha (C^i - C^{\alpha/gr})^2 \quad (20)$$

donde: k^α es una constante característica de la reacción interfacial y C^i la concentración de carbono en la interfase grafito/ferrita, distinta a la de equilibrio. En el segundo paso, la transferencia de los átomos de carbono está controlada por un proceso difusivo, donde el flujo de átomos de carbono está dado por:

$$\phi = \rho_\alpha D_C^\alpha \left. \frac{\partial C^\alpha}{\partial r} \right|_{r=R_{gr}} \quad (21)$$

Reemplazando 17 en 21, igualando el valor resultante con 20 y despejando C^i , se obtiene:

$$C^i = -\frac{D_C^\alpha}{2\hat{r}k^\alpha} + \sqrt{\left(\frac{D_C^\alpha}{2\hat{r}k^\alpha}\right)^2 + \left(\frac{D_C^\alpha}{2\hat{r}k^\alpha}\right)^2 (C^{\alpha/\gamma} - C^{\alpha/gr}) + C^{\alpha/gr}} \quad (22)$$

donde: $\hat{r} = \frac{R_\alpha}{R_{gr}(R_\alpha - R_{gr})}$.

Finalmente, la velocidad de crecimiento de los nódulos de grafito y de las envolturas esféricas de ferrita, se obtienen reemplazando 17 en 15 y, 18 y 19 en 14:

$$\frac{dR_{gr}}{dt} = D_C^\alpha \frac{\rho_\gamma}{\rho_\alpha} \frac{(C^{\alpha/\gamma} - C^i)}{(100 - C^i)} \frac{R_\alpha}{R_{gr}(R_\alpha - R_{gr})} \quad (23)$$

$$\frac{dR_\alpha}{dt} = D_C^\alpha \frac{(C^{\alpha/\gamma} - C^i)}{(C^{\gamma/\alpha} - C^{\alpha/\gamma})} \frac{R_{gr}(R_\alpha - R_{gr})}{R_\alpha} - \frac{\rho_\gamma}{\rho_\alpha} D_C^\gamma \frac{1}{R_\alpha} \frac{(C^{\gamma_0} - C^{\gamma/\alpha})}{(C^{\gamma/\alpha} - C^{\alpha/\gamma})} \quad (24)$$

3.3.2. Cambio de fase eutectoide metaestable

Cuando la temperatura alcanza el punto eutectoide metaestable y si la austenita no ha transformado totalmente en grafito y ferrita, las colonias de perlita nuclean y comienzan a crecer. En este trabajo se asume que las colonias de perlita que nuclean en el volumen de la austenita que aún no ha transformado tienen forma esférica. La nucleación de las colonias de perlita se modela como un proceso continuo, que comienza cuando la aleación alcanza la temperatura eutectoide metaestable, según la siguiente expresión (Lacaze y Gerval, 1998):

$$\frac{dN_p}{dt} = A'_p (N_p^{max} - N_p) F_{T\gamma} \Delta T_p^m \frac{dT}{dt} \quad (25)$$

donde: N_p es la densidad de colonias de perlita, N_p^{max} la densidad máxima de colonias de perlita determinada a partir de una ley de nucleación instantánea de forma tal que el tamaño máximo de una colonia, resultado de la simulación, no sea mayor a $20 \mu m$, A'_p y m son coeficientes que se determinan experimentalmente, ΔT_p es el sobreenfriamiento con respecto a la temperatura eutectoide metaestable, $F_{T\gamma}$ es un coeficiente que varía entre 1 y 0 y representa el porcentaje de austenita transformado.

La fórmula utilizada para el cálculo de la velocidad de crecimiento de las colonias de perlita se basa en la teoría de Zener-Hillert (Zener, 1946; M., 1957). Utilizando esta teoría y considerando que la difusión del carbono ocurre en el volumen de austenita, la velocidad de crecimiento de las colonias está dada por (Varma et al., 2001):

$$\frac{dR_p}{dt} = c_p e^{-Q_V/RT} F_{T\gamma} \Delta T_p^m \quad (26)$$

donde: c_p es un coeficiente función de la composición de la aleación, $e^{-Q_V/RT}$ es un factor proporcional a la movilidad de la interfase perlita/austenita, siendo: Q_V la energía de activación en la interfase perlita/austenita para la difusión del carbono, R la constante universal de los gases, T la temperatura absoluta de la aleación y m un exponente que caracteriza el proceso de crecimiento de las colonias de perlita que puede considerarse controlado por la difusión del soluto en el volumen de la austenita o por la difusión en borde de grano; en este trabajo se asume que el crecimiento es controlado por la difusión del carbono en el volumen de la austenita.

4. PROCEDIMIENTO EXPERIMENTAL

Para la validación del modelo numérico que se presenta en este trabajo los resultados computacionales fueron comparados con mediciones experimentales realizadas en la empresa dedicada a la fundición de hierro gris y nodular, Sánchez y Piccioni, ubicada en la ciudad de Alma Fuerte, Córdoba, Argentina. En el trabajo experimental se coló, en probeteros para determinación de carbono equivalente de sección circular (Figura 6) y cuadrada, una fundición nodular de composición ligeramente hipereutéctica. El estudio termo-metalúrgico llevado a cabo,



Figura 6: Vista superior y de un corte longitudinal de un probetero para determinación de carbono equivalente de sección circular utilizados en los ensayos.

consistió en el registro de las curvas de enfriamiento desde la temperatura de colada hasta la temperatura ambiente y en el análisis de la microestructura final de una de las probetas de sección circular. Una vez enfriada la probeta de sección circular se dividió en dos partes según su plano medio longitudinal, a su vez, cada una de las mitades obtenidas luego del primer corte se cortaron según tres planos transversales (Figura 7), los puntos de la probeta en los que se llevó a cabo el análisis microestructural se indican en la Figura 7, se obtuvieron sus micrografías, se cuantificaron las fases presentes y caracterizaron los nódulos de grafito según su tamaño y cantidad.

La aleación utilizada en los ensayos fué fundida en un horno de inducción de alta frecuencia y de 1500 kg de capacidad, la carga consistió de: 23,26 % de chatarra 1010, 23,26 % de nodular de retorno, 6,6 % de arrabio, 41,8 % de charco, para ajustar el contenido de carbono adecuado se carburó con 1,6 % de carbono (rendimiento del 90 %), 2,0 % de chapitas de acero, 0,15 % de SiCa y se utilizó FeSi (75 % Si) grueso para ajustar el % de Si del metal base en el horno de inducción, el metal base se sobrecalentó a 1650 °C durante un tiempo de aproximadamente 20 minutos, como agente nodulizante se utilizó 1,5 % de FeSiMgCe y se aplicó el método sándwich, razón por la cual la inoculación se efectuó en una primera cuchara de reacción, donde se agregó 0.7 % de FeSi (75 % Si) molido ó fino, finalmente, el metal fundido se volcó en la cuchara de colada para el llenado de los probeteros.

Luego de procesar los resultados correspondientes a la evolución térmica, se seleccionó una de las probetas de sección circular para su estudio térmico-microestructural.

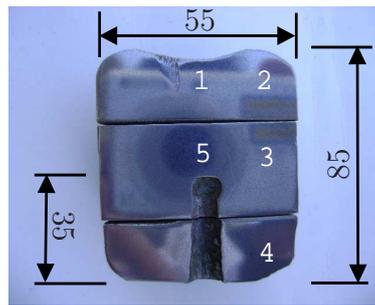


Figura 7: Vista de un corte longitudinal de la probeta estudiada, indicación de los puntos seleccionados para su estudio microestructural y de sus dimensiones.

Los principales elementos que conforman la composición química de la aleación colada pueden verse en la Tabla 1.

Elemento	C	Si	Cu	Mn	P
%	3,8	2,37	0.07	0,11	0.057

Tabla 1: Principales elementos de la composición química de la aleación utilizada (expresado en porcentaje en peso).

Las tres muestras se desbastaron por medios convencionales con pliegos de granulometría 180, 240, 400, 600, 800, 1000 y 1500, y se pulieron con pasta de diamante de granulometría $6 \mu m$, luego, las muestras fueron observadas en un microscopio óptico Olympus PMG 3 equipado con una cámara de video conectada a una PC donde se visualizaron y analizaron las imágenes captadas en el microscopio mediante el software para análisis de imágenes Motic Image Plus 2.0, para finalmente procesar y analizar las correspondientes a los cinco puntos de interés (Figura 7 y 8). En el estudio metalúrgico se determinaron las fracciones volumétrica de grafito, ferrita y perlita, además se identificó el nódulo más grande y más chico correspondiente a cada zona analizada, para luego tomando estos dos valores como limitantes y, para facilitar la interpretación y comparación de los resultados experimentales con los numéricos, los nódulos de grafito se agruparon según su tamaño en 10 familias; en la Tabla 2 se indican los valores de los radios de los nódulos de grafito que delimitan cada familia y el número de familia asignada para su posterior comparación con los resultados numéricos.

Familia	Punto 1 μm	Punto 2 μm	Punto 3 μm	Punto 4 μm	Punto 5 μm
1	0.0-1.44	0.0-1.44	0.0-1.44	0.0-1.44	0.0-1.44
2	1.44-8.8	1.44-4.98	1.44-4.87	1.44-3.97	1.44-5.4
3	8.8-16.3	4.98-8.52	4.87-8.31	3.97-6.5	5.4-9.36
4	16.3-23.7	8.52-12.05	8.31-11.75	6.50-9.03	9.36-13.32
5	23.7-31.2	12.05-15.6	11.75-15.2	9.03-11.56	13.32-17.3
6	31.2-38.61	15.6-19.13	15.2-18.62	11.56-14.10	17.3-21.24
7	38.61-46.04	19.13-22.67	18.62-22.06	14.10-16.62	21.24-25.2
8	46.04-53.5	22.67-26.21	22.06-25.5	16.62-19.15	25.2-29.16
9	53.5-60.91	26.21-29.75	25.5-28.94	19.15-21.7	29.16-33.12
10	60.91-68.3	29.75-33.3	28.94-32.37	21.7-24.21	33.12-37.08

Tabla 2: Radios de los nódulos de grafito correspondientes a cada familia en cada punto.

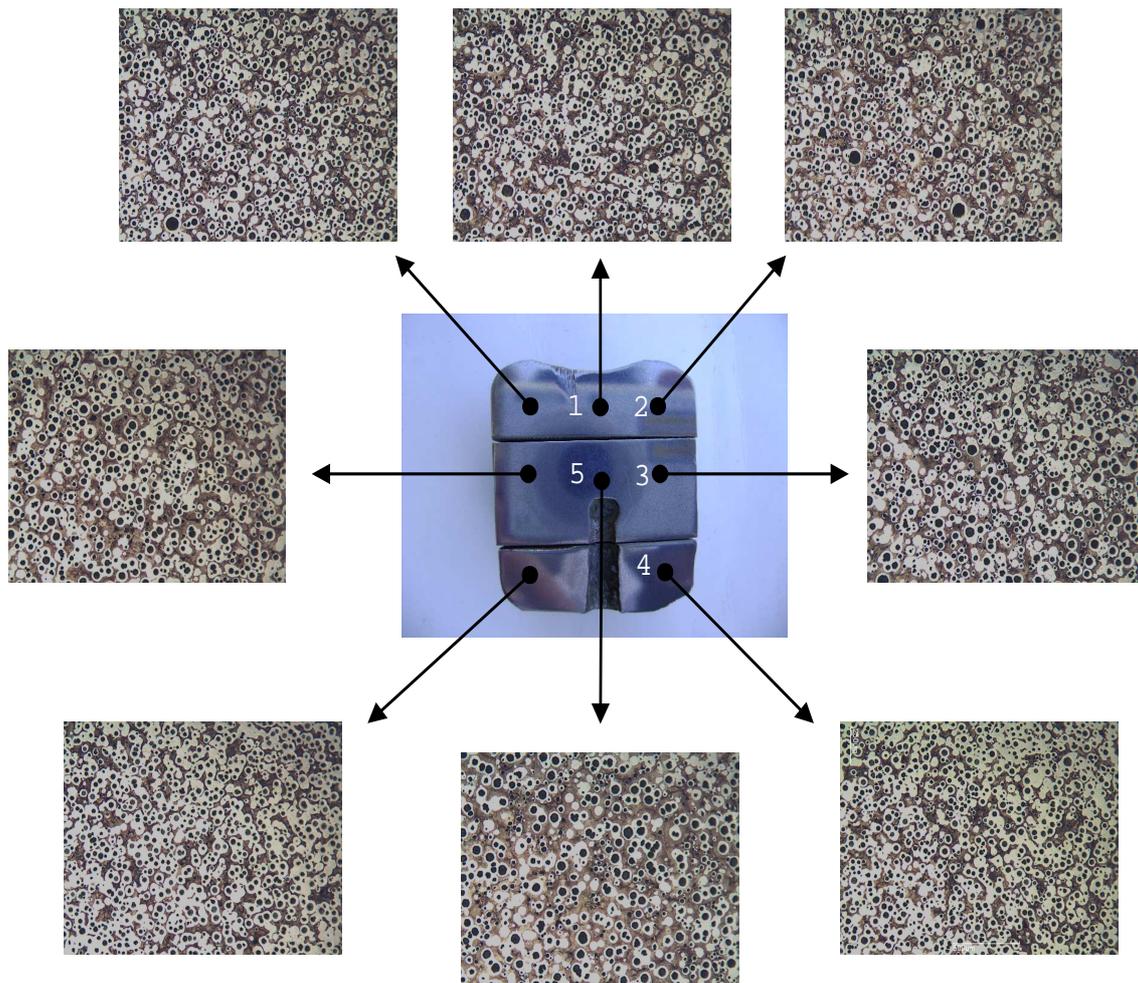


Figura 8: Vista de un corte longitudinal de la probeta estudiada con las micrografías correspondientes a los cinco puntos seleccionados para su estudio microestructural.

5. PROCEDIMIENTO COMPUTACIONAL

La simulación del enfriamiento de la fundición nodular estudiada se lleva a cabo mediante un modelo macroestructural que resuelve la ecuación de la energía 1 por el método de los elementos finitos (Celentano et al., 1994). Dada la simetría del problema se discretizó el plano longitudinal medio del conjunto pieza-molde con elementos cuadriláteros de cuatro nodos, 200 para la pieza y 250 para el molde (Figura 9), además, se utilizaron elementos de contacto para simular el flujo de calor entre la pieza y el molde y elementos superficiales para representar la extracción de calor por convección en las superficies exteriores de la pieza y del molde en contacto con el ambiente. En las Tablas 3 y 4 se indican los valores de los coeficientes y de las propiedades termo-físicas de la fundición y de la arena utilizadas en la simulación numérica. La temperatura inicial de la pieza se asume uniforme e igual a la máxima temperatura registrada por la termocupla al momento de llevar a cabo los ensayos; $1251,05\text{ }^{\circ}\text{C}$, para el molde se adopta la temperatura registrada por el sensor ambiente al momento de iniciar el experimento, $23,45\text{ }^{\circ}\text{C}$.

Un esquema del conjunto pieza-molde con las condiciones de contorno y la malla de elementos finitos puede verse en la Figura 9.

Las expresiones utilizadas para el cálculo de la temperatura eutéctica y de las concentraciones

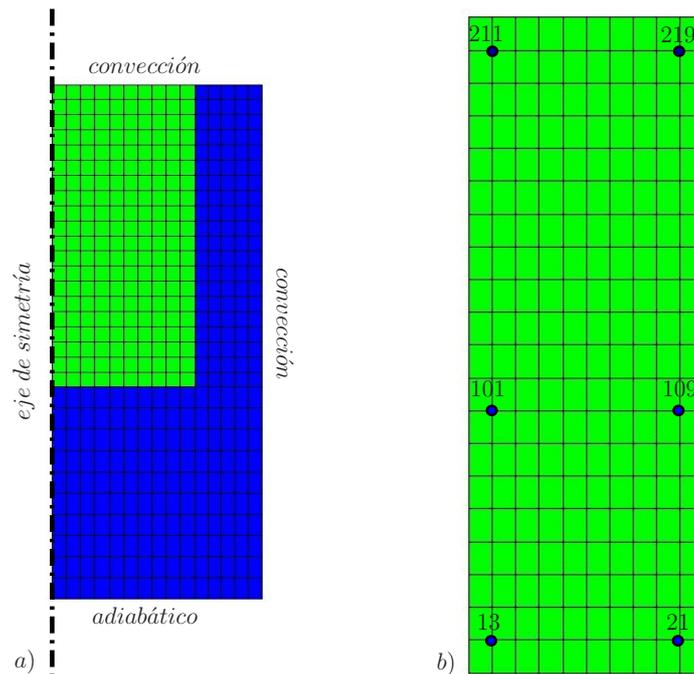


Figura 9: a) Malla de elementos finitos con las condiciones de simetría y de contorno impuestas. b) Pieza mallaada con los números de los nodos equivalentes a los puntos indicados en la pieza (Figura 7).

de equilibrio de carbono que intervienen en las ecuaciones 9, 10, 11, 12, han sido extraídas de Heine (1986); Boeri (1989). Por otro lado, las expresiones utilizadas para el cálculo de los coeficientes de difusión del carbono en la austenita y en la ferrita se extrajeron de Lacaze y Gerval (1998).

El valor de la concentración de equilibrio de carbono en la austenita en contacto con el grafito entre las temperaturas eutéctica y eutectoide estable (línea AB en la Figura 4) utilizada en la ecuación 13, se calcula como sigue:

$$C^{\gamma/gr} = 0,00334482848030700T - 3,91144242487100 + C^{\gamma tic} \quad (27)$$

donde: $C^{\gamma tic}$ representa la máxima solubilidad de carbono en la austenita (punto A de la Figura 4), y está dado por la concentración de carbono en la austenita al finalizar la solidificación, esta cantidad se obtiene a partir del balance de masa expresado como:

$$C^{\gamma tic} = \frac{(\%C\rho_{\gamma} - 100f_{gr}\rho_{gr})}{(1 - f_{gr})\rho_{\gamma}} \quad (28)$$

Por otro lado, las concentraciones de equilibrio de carbono en la ferrita en contacto con la austenita y el grafito, y en la austenita en contacto con la ferrita (Figura 5), empleadas en las ecuaciones 23 y 24, se calcularon a partir de las siguientes expresiones:

$$C^{\gamma/\alpha} = 0,8 \frac{(T - 910)}{(T_{\alpha}^0 - 910)} \quad (29)$$

$$C^{\alpha/\gamma} = 0,02 \frac{(T - 910)}{(T_{\alpha}^0 - 910)} \quad (30)$$

$$C^{\alpha/gr} = 0,02 + (0,02 - 0,006) \frac{(T - T_{\alpha}^0)}{T_{\alpha}^0} \quad (31)$$

Temperatura [$^{\circ}C$]	Conductividad [$J/sm^{\circ}C$]	Calor específico [kJ/kgK]
420	40.9	-
560	37.1	-
600	-	750
700	33.6	-
800	-	750
840	28.1	-
980	22.5	-
1120	18.8	-
1145	-	820
1155	-	840
1250	120.0	-
1400	840	-
Densidad [kg/m^3] : 7000		
Calor latente eutéctico [kJ/kg] : $L_{tic} = 230$		
Coeficiente de difusión del carbono [m^2/s] : $D_C^l = 2,0x10^{-10}$, $D_C^{\gamma} = 9,0x10^{-11}$		
Parámetros de nucleación grafito: $b = 4,0x10^{13}$ [$n^{\circ}grano/m^3^{\circ}Cs$] y $c = 340$ [$^{\circ}C$]		
Parámetro de nucleación austenita [$n^{\circ}grs/m^3^{\circ}C$] : $A = 1,0x10^7$		
Coeficiente de Gibbs-Thompson [Km] : $\Gamma = 2,0x10^{-7}$		
Densidad ferrita/ densidad grafito: 3,46		
Calor latente eutectoide [kJ/kg] : $L_{oid} = 90$		
Constante nucleación perlita [$n^{\circ}grs/m^3^{\circ}C$] : $A'_p = 3,0x10^{13}$.		
Constante termodinámica crecimiento perlita: $c_{p=} 1,03x10^{-3}$		
Energía de activación crecimiento perlita [J] : $Q_v = 125000$		
Temperatura eutectoide estable y metaestable [$^{\circ}C$] : $T_{\alpha}^0 = 761$ y $T_p^0 = 752$		

Tabla 3: Propiedades termofísicas de la fundición.

Temperatura [$^{\circ}C$]	Conductividad [$J/sm^{\circ}C$]	Densidad [kg/m^3]	Calor específico [kJ/kgK]
20	-	1565	810
100	0.478	1561	-
200	0.505	1557	-
300	0.517	1553	870
400	0.516	1548	-
500	0.511	1542	920
600	0.507	1535	-
700	0.507	1530	950
800	0.517	1526	1000
900	0.547	1522	1150
1000	0.600	1518	1197
1100	0.682	1512	1285

Tabla 4: Propiedades termofísicas de la arena.

Temperatura [$^{\circ}C$]	Coficiente conductancia [$J/sm^2\ ^{\circ}C$]
20	100
1170	1000
1400	1000

Tabla 5: Coeficientes de conductancia de los elementos de contacto pieza-molde.

Interfaz	Coficiente de transferencia de calor [$J/sm^2\ ^{\circ}C$]
Fundición - Aire	100
Molde - Aire	70

Tabla 6: Coeficientes de convección pieza-ambiente y molde-ambiente.

6. RESULTADOS Y DISCUSIÓN

En las Figuras 10 y 11 se muestran las curvas y las velocidades de enfriamiento simuladas correspondientes a los puntos 1, 2, 3, 4 y 5 (Figura 7). Al estudiar ambas curvas se observa que existe relación entre las velocidades de enfriamiento y la extensión de la meseta de solidificación en los cinco puntos, las curvas de enfriamiento de los puntos que enfrían más rápido al inicio de la solidificación, puntos 4 y 2, no presentan un amesetamiento en su curva de enfriamiento durante dicho cambio de fase, esto resulta razonable teniendo en cuenta que los puntos 4 y 2 está en contacto con las paredes lateral e inferior del molde y con la pared lateral del molde y el ambiente respectivamente, las velocidades de enfriamiento de los puntos 3 y 1 son intermedias entre los puntos de mayor velocidad de enfriamiento, puntos 1 y 4, y el punto ubicado en la zona central de la pieza, punto 5, cuya velocidad de enfriamiento es la menor de los cinco puntos. Finalizada la solidificación y a medida que la temperatura del molde aumenta y las curvas de enfriamiento se cruzan, los puntos 1 y 2, ubicados en la parte superior de la pieza en contacto con el ambiente, enfrían a mayor velocidad que los puntos 3, 4 y 5, y son los primeros en comenzar el cambio de fase eutectoide estable y metaestable (Figura 11). Este cambio en las velocidades de enfriamiento se debe al modo de enfriamiento de la pieza, dado que a medida que el molde aumenta su temperatura, el flujo de extracción de calor tiende a ser máximo en los puntos ubicados en el plano superior y próximos al ambiente (Figura 7), dirigiéndose hacia la parte más baja de la pieza donde el molde se encuentra a menor temperatura.

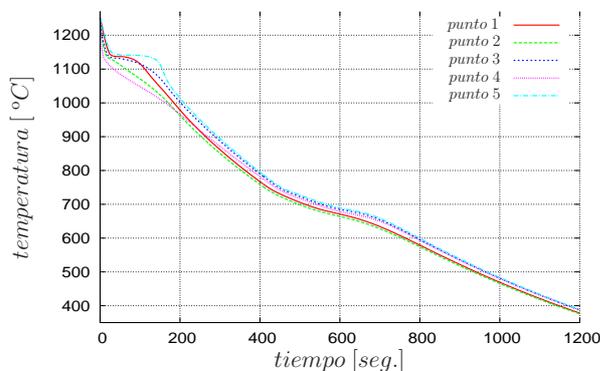


Figura 10: Curvas de enfriamiento simuladas.

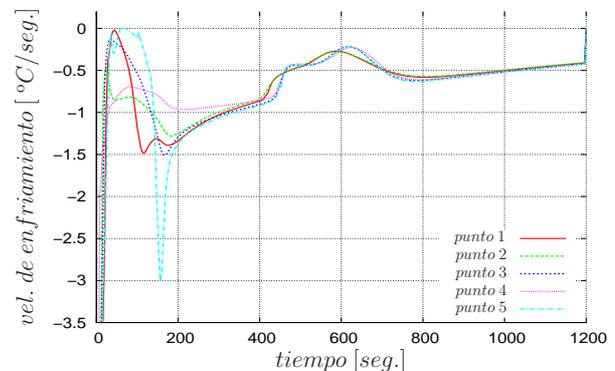


Figura 11: Velocidades de enfriamiento simuladas.

En las Figuras 12 y 13 se grafican las curvas de enfriamiento y de velocidad de enfriamiento simulada y experimental en el punto 5, analizando ambas figuras, se observa que tanto el so-

reenfriamiento como la recalescencia registrados en los ensayos durante la solidificación son mayores que en la simulación. Esto puede deberse a las menores velocidades de enfriamiento desde la colada hasta alcanzar la temperatura eutéctica en las simulaciones que en los ensayos (Figura 11), como así también a un calor latente eutéctico bajo, por otro lado y a partir de lo mostrado en la Figura 13, se observa que el tiempo de solidificación de la curva simulada es mayor que en la curva resultado de los ensayos. Finalizada la solidificación y hasta antes del comienzo de la transformación eutécticoide estable, la velocidad de enfriamiento de la curva simulada es menor que en los ensayos, al ser despreciable el calor latente vinculado a los cambios de fase que suceden durante este intervalo de temperatura. Esta diferencia puede deberse a los valores de los parámetros termo-físicos de la aleación ó del molde usados en las corridas, como así también al desgranamiento del molde registrado en los ensayos durante el enfriamiento de la pieza. Durante los cambios de fase eutécticoide, el acuerdo logrado entre ambas curvas es bueno, no obstante estas diferencias y la separación de las curvas de enfriamiento una vez finalizado el cambio de fase eutécticoide, los acuerdos alcanzados en los tiempos y las mesetas de dicho cambio de fase son buenos.

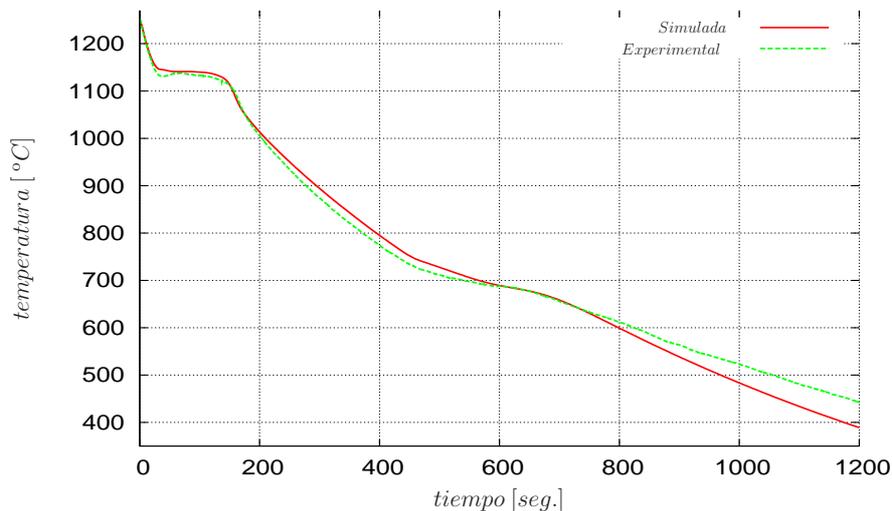


Figura 12: Curva de enfriamiento experimental y simulada en el punto 5.

En la Figura 14 se grafica la evolución de la temperatura y de las fracciones de fase resultados de la simulación en los puntos 1, 2, 3 y 4, en ésta puede observarse que el orden en que los puntos terminan de solidificar; 4, 2, 1 y 3, está relacionado con la extensión de las mesetas durante la solidificación (Figura 10), y ésta a su vez con las principales características de la solidificación de una fundición nodular: el tamaño del grano de austenita y los tamaños y la distribución de los nódulos de grafito (Figura 16). Las fracciones de fase obtenidas guardan relación directa con las velocidades de solidificación en los cuatro puntos; siendo los puntos de mayor fracción de grafito y ferrita y, consiguientemente de menor cantidad de perlita, los de mayor velocidad de enfriamiento, puntos 4, 2, 1 y 3 respectivamente (Figura 11). Durante los cambios de fase eutécticoide estable y metaestable, no existe una relación directa entre las velocidades de enfriamiento y las fracciones de fase respectivas. Esto puede deberse a las bajas velocidades de enfriamiento durante el cambio de fase eutécticoide estable, lo cual favorece la transformación del carbono según el sistema estable en el intercrítico $\alpha + \gamma + gr$ (Figura 5), lo cual revela que las características de las transformaciones en estado sólido, están más condicionadas con los resultados de la cinética de los cambios de fase durante la solidificación que con la velocidad de enfriamiento

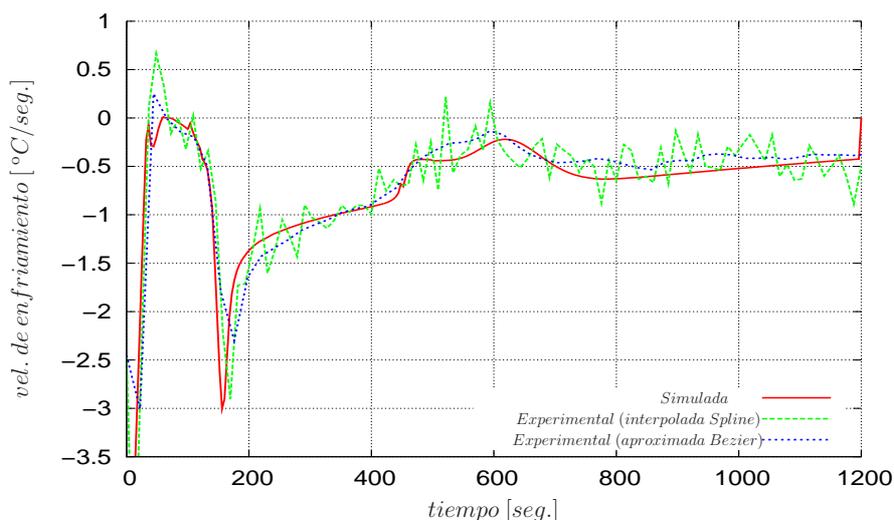


Figura 13: Velocidad de enfriamiento experimental y simulada en el punto 5.

del proceso. Aún con las diferencias mencionadas, del análisis de la Figura 14 puede verse que a excepción del punto 3, en el resto de los puntos las fracciones de fase simuladas resultan muy próximas entre sí y corresponden a una fundición nodular semiperlítica como la utilizada en los ensayos (Tabla 1).

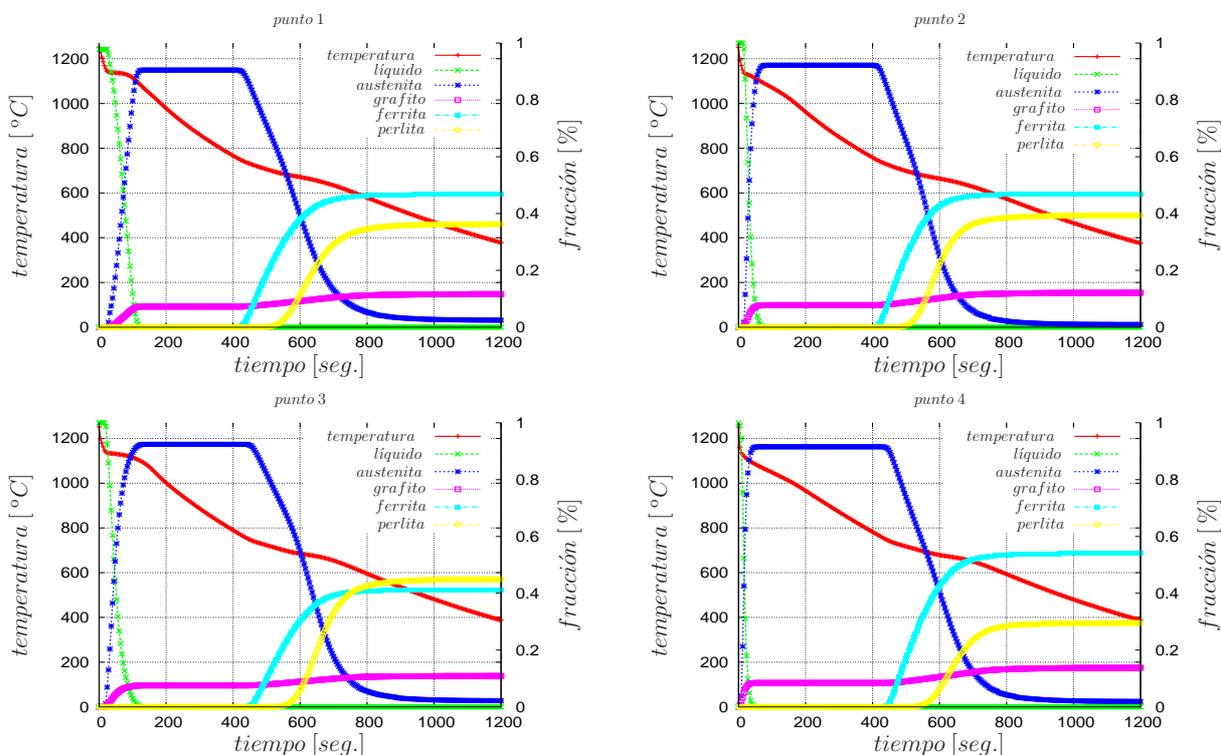


Figura 14: Curva de enfriamiento y evolución de fracciones volumétricas simuladas en los puntos 1, 2, 3 y 4.

En la Figura 15 se grafican las fracciones de grafito, ferrita y perlita resultado de la simulación y de los ensayos de laboratorio para los puntos 1, 2, 3 y 4, en ésta puede observarse que aún habiéndose considerado el crecimiento del grafito durante todo el enfriamiento, las cantidades

simuladas de esta fase fueron inferiores a las experimentales en todos los puntos, habiendo ocurrido lo mismo con la fracción de ferrita aunque en menor cantidad porcentual. Las menores cantidades de grafito obtenidas en la simulación, y el crecimiento de los nódulos casi nulo entre la temperatura eutéctica y la eutectoide estable, puede deberse a valores inadecuados de las concentraciones de equilibrio de carbono que definen la línea de desaturación de carbono de la austenita entre dichos límites de temperatura (Figura 4), o a un valor inadecuado del tamaño del grano de austenita que rodea a cada nódulo de grafito (ecuación 13 y Figura 4), valor no definido aún en nuestro modelo de cambio de fase sólido a partir de la teoría de solidificación multinodular.

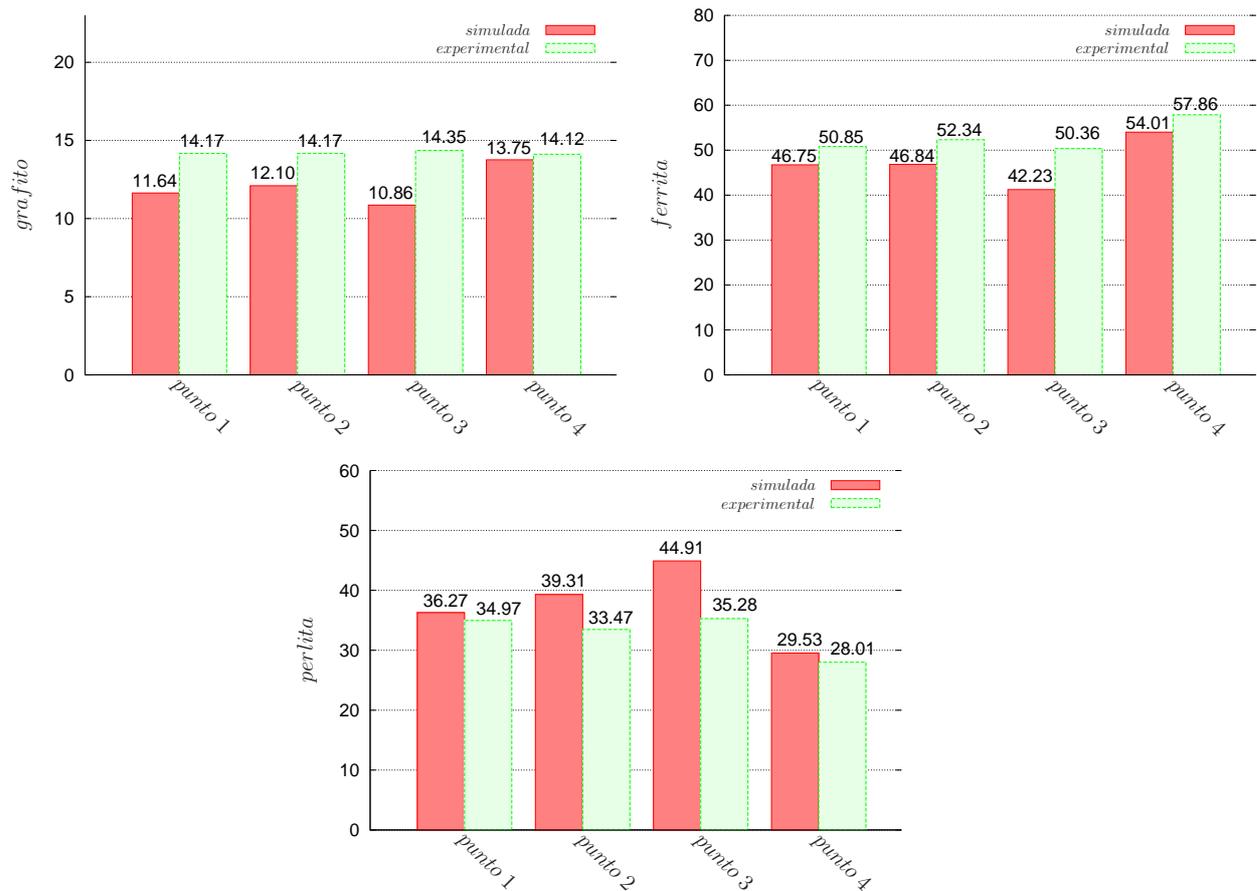


Figura 15: Fracciones volumétricas de grafito, ferrita y perlita experimentales y simuladas para los puntos 1, 2, 3 y 4.

En la Figura 16 se muestran las densidades de los nódulos de grafito correspondientes a los puntos 1, 2, 3 y 4 obtenidos al final de las transformaciones de fase en estado sólido y clasificados para cada punto según los rangos de diámetros y familias indicadas en la Tabla 2. En ésta puede observarse que la cantidad de nódulos simulados y pertenecientes a la familia 0 es despreciable comparada con la cantidad de nódulos pertenecientes a las familias 1, 2 en los mismos puntos. La mayor diferencia entre la cantidad de los nódulos simulados y experimentales corresponde a la familia 1 para el punto 1, y para el resto de los puntos a la familia 2, siendo mayor en el punto 5 cuya velocidad de enfriamiento es la menor durante todo el enfriamiento y la meseta de solidificación es la mayor de los cinco puntos analizados (Figura 11). Analizando la relación entre la cantidad de grafito (Figura 15) y la distribución de tamaños de nódulos de grafito (16),

se observa que el punto con una cantidad uniforme de nódulos de grafito pertenecientes a las familias 2 y 3, punto 4, presenta la mayor cantidad de grafito y ferrita simulada, seguido por los puntos 5, 2, 1 y 3 con igual tendencia, por otro lado, las relaciones entre las cantidades de fase experimentales y la distribución de tamaños de nódulos es uniforme. También puede observarse que existe una correspondencia entre la densidad de nódulos de grafito y la extensión de la meseta de solidificación, de la velocidad de enfriamiento y del tiempo de solidificación (Figuras 11, 14 y 16), siendo mayor la densidad de nódulos de grafito en los puntos que solidifican a mayor velocidad, puntos 4, 2, 1 y 3 respectivamente, a excepción del punto 5 (Figura 16).

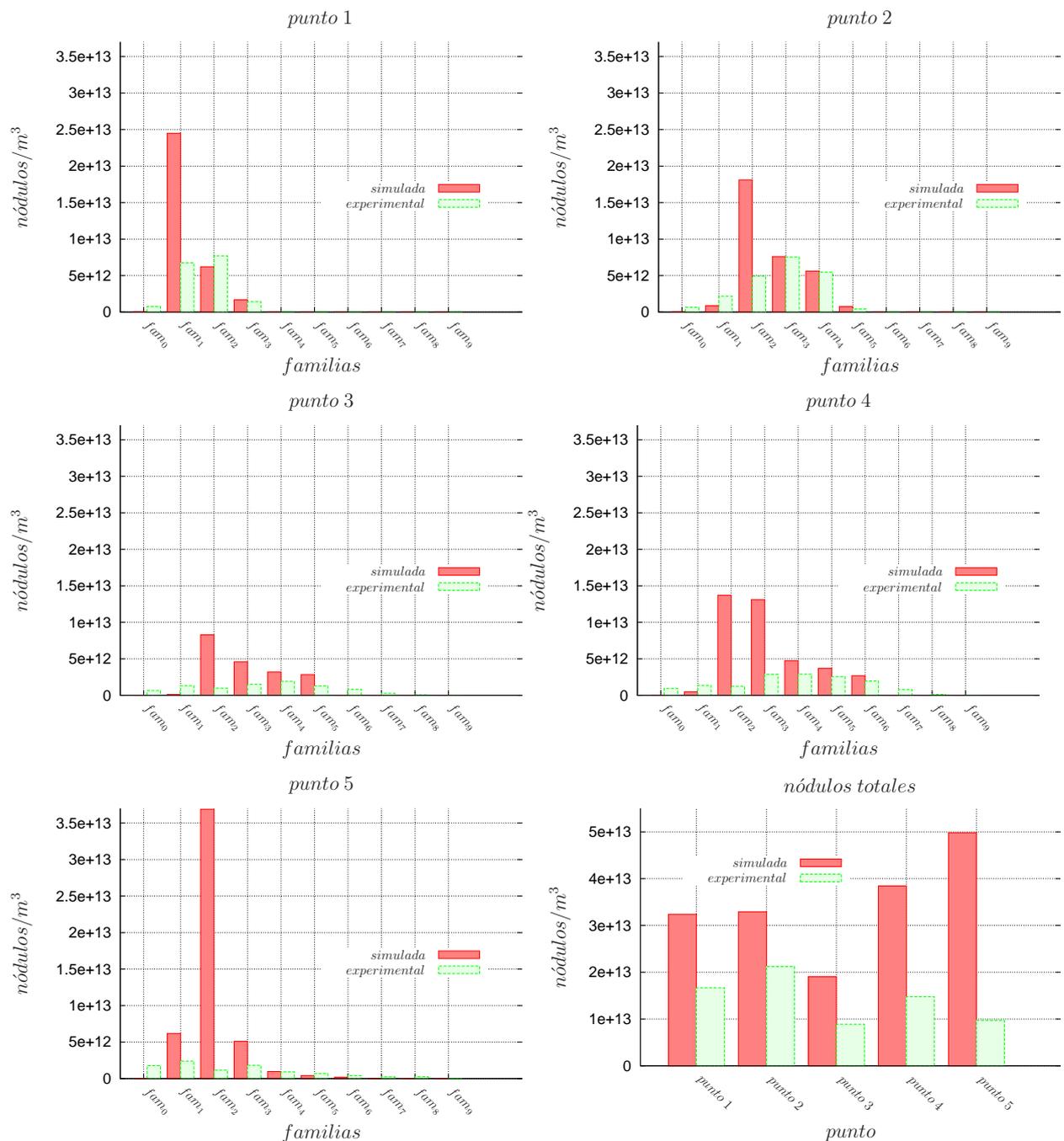


Figura 16: Densidad de nódulos de grafito experimentales y simuladas en los puntos 1, 2, 3 y 4 y densidad total en cada punto.

Finalmente y a partir del análisis llevado a cabo, puede decirse que las principales diferencias entre las fracciones de fase simuladas y experimentales dadas en el grafito, se deben a una velocidad de crecimiento insuficiente en las simulaciones (Figura 15 y 14). Las fracciones de fase resultado de la simulación resultan muy próximas en los cinco puntos, a excepción del punto 3 en el cual hay mayor cantidad de perlita que de ferrita (Figura 15), esto es un resultado aceptable para una fundición nodular con pequeñas cantidades de Cu y Mn y una pieza pequeña y de geometría sencilla colada en un molde de arena. El modelo computacional marca una tendencia a obtener una matriz ferrítica en los puntos cuya velocidad de enfriamiento es más baja, punto 1 y 5, y perlítica en los puntos próximos al molde cuya velocidad de enfriamiento es mayor, puntos 2, 3 y 4. Además se observa una marcada relación entre la distribución de los nódulos de grafito, la velocidad de enfriamiento, la extensión en la meseta de solidificación y las fracciones de grafito y ferrita obtenidas al igual que en las cantidades de fase resultado de los ensayos experimentales.

7. CONCLUSIONES

En este trabajo se compararon los resultados del proceso de colada y moldeo de una fundición nodular de composición ligeramente hipereutéctica y de matriz semiperlítica en un probetero para determinación de carbono equivalente de sección circular, con los obtenidos de su simulación termo-metalúrgica mediante elementos finitos. Los resultados obtenidos al final de la solidificación modelada según la teoría plurinodular, se acoplaron a un modelo de cambio de fase en estado sólido que comprendió el crecimiento de los nódulos de grafito entre la temperatura eutéctica y eutectoide estable y los cambios de fase eutectoide estable y metaestable, considerando ambos cambios de fase eutectoide como dos procesos competitivos, obteniéndose buenos resultados a partir de las comparaciones de los resultados experimentales y numéricos. Las diferencias observadas en las fracciones de fase entre el trabajo experimental y la simulación, sugieren revisar con más detalle las magnitudes de algunos parámetros térmicos del modelo, pudiendo, también, deberse a la carencia de valores precisos para los coeficientes que intervienen en las fórmulas de nucleación y crecimiento en los cambios de fase eutectoide estable y metaestable para una composición química específica, lo cual pone de manifiesto la necesidad de desarrollar experimentos que permitan identificar y caracterizar la transformación eutectoide estable y metaestable a los fines de obtener valores precisos de los coeficientes involucrados en las diferentes leyes de nucleación y crecimiento. Finalmente, del desarrollo de este trabajo se desprende la importancia de lograr una adecuada comprensión de los diferentes fenómenos involucrados en la cinética de las transformaciones de fase para su correcto modelado, como así también el rol fundamental del modelado numérico de un proceso termo-metalúrgico, acoplado los cambios de fase en estado líquido con los que ocurren en estado sólido, pudiendo de esta manera determinar a escala microscópica las cantidades función de las cuales dependen las propiedades mecánicas de una pieza de fundición nodular, algo poco visto en la bibliografía para un proceso termo-metalúrgico completamente acoplado.

REFERENCIAS

- Aagaard R., Hattel J., Schafer W., Svensson I.L., y Hansen P. Simulation vs. reality of an industrial ductile iron casting. *AFS Transactions*, 96:659–667, 1996.
- Banerjee D. y Stefanescu D. Structural transitions and solidification kinetics of sg cast iron during directional solidification experiments. *AFS Transactions*, 99:747–759, 1991.
- Boeri R. *The Solidification of Ductile Cast Iron*. University of British Columbia, Canadá, 1989.

- Celentano D., Oñate E., y 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.
- Chang S., Shangguan D., y Stefanescu D. Modeling of the liquid/solid and the eutectoid phase transformations in spheroidal graphite cast iron. *Metallurgical Transactions A*, 23A:1333–1346, 1992.
- Chang S., Shangguan D., y Stefanescu D. Prediction of microstructural evolution in sg cast iron from solidification to room temperature. *AFS Transactions*, 99:531–541, 1999.
- Charbon C. y Rappaz M. 3d stochastic modelling of nodular cast iron solidification. *Physical Metallurgy of Cast Iron V, Advanced Materials Research*, 4-5:453–460, 1997.
- Dardati P. *Simulación Micromecánica de la Solidificación de la Fundición Dúctil*. Universidad Nacional de Córdoba, Argentina, 2005.
- Dardati P., Celentano D., Godoy L., Chiarella A., y Schulz B. Microstructural simulation of solidification process of spheroidal-graphite cast iron. *International Journal of Cast Metals Research*, 22 (5):390–400, 2009.
- Dardati P., Godoy L., y Celentano D. Microstructural simulation of solidification process of spheroidal-graphite cast iron. *Journal of Applied Mechanics*, 73 (6):977–983, 2006.
- Frás E., Kapturkiewicz W., y Burbelko A. Computer modeling of primary structure formation in ductile iron. *Physical Metallurgy of Cast Iron V, Advanced Materials Research*, 4-5:499–504, 1997.
- Heine R. The fe-c-si solidification diagram for cast irons. *AFS Transactions*, 86-71:391–402, 1986.
- Lacaze J. y Gerval V. Modelling of the eutectoid reaction in spheroidal graphite fe-c-si alloys. *ISIJ International*, 38 (7):714–722, 1998.
- Liu J. y Elliot R. The influence of cast structure on the austempering of ductile iron. part 1: Modelling of the influence of nodule count on microsegregation. *International Journal of Cast Metals Research*, 10:301–305, 1998.
- Liu J. y Elliot R. The influence of cast structure on the austempering of ductile iron. part 2: Assessment of model calculations of microsegregation. *International Journal of Cast Metals Research*, 12:75–82, 1999.
- M. H. The formation of pearlite. *Transactions AIME*, 209:170, 1957.
- Ohnaka I. Progress in computer simulation of casting of spheroidal graphite cast iron in japan. *International Journal of Cast Metals Research*, 11 (5):267–272, 1999.
- Pang H. y Stefanescu D.M. Solidification science and processing. *Proc. Int. Symp. on Advanced materials and technology for the 21st century, ed. I. Ohnaka and D. M. Stefanescu*, Warrendale, PA, TMS, páginas 149–158, 1996.
- Rivera G., Boeri R., y 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.
- Sikora J., Boeri R., y G. R. 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, Romania*, páginas 321–329, 2001.
- Stefanescu D. Solidification and modelling of cast iron - a short history of the defining moments. *Materials Science and Engineering A*, 413-414:322–333, 2005.
- Stefanescu D. *Science and Engineering of Casting Solidification*. Springer, 2008.
- Varma M.R., Sasikumar R., Pillai S.G., y Nair P.K. Cellular automaton simulation of microstructure evolution during austenite decomposition under continuous cooling condition.

- Bull. Mater. Sci.*, 24:305–312, 2001.
- Venugopalan D. A kinetic model of the $\gamma + \alpha + \text{gr}$ eutectoid transformation in spheroidal graphite cast irons. *Metallurgical Transactions A*, 21 A:913–918, 1990.
- Wenzhen L. y Baicheng L. Microstructure simulation and property prediction of spheroidal graphite iron casting. *62nd World Foundry Congress, Pennsylvania, USA*, 1996.
- Wessén M. y Svensson I.L. Modelling of ferrite growth in nodular cast iron. *Metallurgical Transactions A*, 27 A:2209–2220, 1996.
- Zener C. *Transactions AIME*, 167:550–583, 1946.