

MODELO PARA LA SIMULACIÓN NUMÉRICA DE LA SOLIDIFICACIÓN DE LA FUNDICIÓN DÚCTIL

Patricia M. Dardati^{*}, Luis A. Godoy^{**}, Diego J. Celentano[†], Héctor R. Bertorello^{††}

^{*} Facultad Regional Córdoba
Universidad Tecnológica Nacional
Córdoba, Argentina. e-mail: pdardati@industrial.frc.utn.edu.ar

^{**} Facultad de Ciencias Exactas, Físicas y Naturales
Universidad Nacional de Córdoba
Córdoba, Argentina. e-mail: lgodoy@com.uncor.edu

[†] Departamento de Ingeniería Mecánica
Universidad de Santiago de Chile
Santiago de Chile, Chile. e-mail: dcelenta@lauca.usach.cl

^{††} Facultad de Matemática Astronomía y Física
Universidad Nacional de Córdoba
Córdoba, Argentina. e-mail: berto@famaf.unc.edu.ar

Palabras clave: Microstructure Evolution, SG Cast Iron, Solidification.

Resumen. *En este trabajo se presenta un novedoso modelo para la simulación numérica de la evolución de la microestructura de una fundición dúctil eutéctica durante el proceso de solidificación equiaxial. Dicho modelo responde a la teoría multinodular (o plurinodular) de solidificación de la fundición dúctil, que considera la nucleación independiente del carbono y la austenita y el crecimiento dendrítico de esta última. El modelo micromecánico que se propone es de tipo fenomenológico y tiene en cuenta la nucleación y el crecimiento dendrítico de la austenita, la nucleación y el crecimiento esférico del grafito, la microsegregación y balance de masa de soluto (carbono) y el crecimiento diferenciado de los nódulos de grafito en las zonas interdendrítica e intergranular.*

La ecuación de la energía que considera transmisión de calor por conducción y generación de calor latente de solidificación a través del mencionado modelo micromecánico, se plantea a nivel macroscópico.

1 INTRODUCCIÓN

La fundición dúctil o nodular es un material de gran importancia en la industria actual. Por sus características, tales como menor costo y excelentes propiedades mecánicas, ha reemplazado al acero en numerosas aplicaciones. Desde que fuera obtenido por primera vez, a mediados del siglo pasado, fueron muchos los intentos por explicar el proceso de solidificación de este material, ya que comprenderlo en su totalidad permitiría tener un mayor control sobre el mismo y, de esa manera, sobre las propiedades físicas finales del producto. Varias son las teorías que se propusieron a lo largo del tiempo¹, en la actualidad subsisten principalmente dos, la teoría uninodular²⁻⁹ y la teoría plurinodular¹⁰⁻¹⁸. Si bien ahora la teoría plurinodular muestra un franco avance sobre la uninodular, no son muchas las propuestas realizadas para el tratamiento computacional de la misma, por el contrario sí son numerosos los modelos numéricos que tienen como objetivo la simulación de la solidificación de la fundición dúctil según la teoría uninodular. Los análisis numéricos realizados basándose en el modelo plurinodular^{13,19,20} son en general sencillos y simplifican algunos aspectos importantes de la teoría.

La teoría plurinodular puede resumirse en los siguientes puntos¹³:

1. Las nucleaciones de la austenita y del grafito son independientes.
2. La austenita crece en forma dendrítica mientras que el grafito lo hace en forma esférica.
3. El grafito crece inicialmente en contacto con el líquido pero, al entrar en contacto con las dendritas de austenita, los nódulos son rodeados por esta.
4. Una vez rodeadas por la austenita las esferas de grafito crecen por difusión del carbono, desde el líquido hacia los nódulos, a través de la austenita.

Las principales diferencias entre las dos teorías mencionadas pueden resumirse según se muestra en el siguiente cuadro:

	<i>Teoría uninodular</i>	<i>Teoría plurinodular</i>
<i>Nucleación de la austenita</i>	La austenita eutéctica no tiene nucleación independiente y crece a partir de los nódulos de grafito.	La austenita eutéctica nuclea en el líquido en forma independiente.
<i>Crecimiento de la austenita</i>	La austenita crece en forma esférica alrededor de los nódulos de grafito.	La austenita crece en forma dendrítica y al entrar en contacto con los nódulos de grafito los envuelve
<i>Unidad de solidificación</i>	La unidad de solidificación está constituida por un nódulo de grafito rodeado por una envoltura esférica de austenita.	La unidad de solidificación está constituida por un grano de austenita (de crecimiento dendrítico) y los nódulos de grafito que quedaron atrapados en él

En el presente trabajo se propone un modelo numérico para la simulación de la solidificación equiaxial de la fundición nodular, según la teoría plurinodular. En el mismo se

plantea la nucleación independiente e instantánea de la austenita, regulada por la velocidad de enfriamiento al momento del comienzo de la solidificación y una nucleación continua del grafito dependiente del tratamiento del líquido y del sobreenfriamiento (esto último implica, indirectamente, una dependencia de la velocidad de enfriamiento). Un aspecto importante del trabajo consiste en la combinación, en el mismo modelo, del crecimiento dendrítico de la austenita y el crecimiento esférico del grafito, distinguiendo para este último el que se produce en el líquido interdendrítico del que ocurre en el líquido intergranular. Se considera que los nódulos de grafito dejan de crecer cuando han sido rodeados por la austenita. Se mantiene en todo momento el balance de masa de soluto (carbono). A los fines de simplificar el modelo, los crecimientos de la austenita y del grafito se consideran desacoplados.

2 FORMULACIÓN TÉRMICA- MICROESTRUCTURAL

Los primeros trabajos orientados a modelar el fenómeno de solidificación han sido realizados desde un punto de vista macroscópico ²¹.

Para considerar el enfriamiento de una pieza de fundición, si sólo se tiene en cuenta la propagación del calor por conducción, se puede expresar la ecuación de la energía de la siguiente forma:

$$\mathbf{r} c \dot{T} = \nabla \cdot (k \cdot \nabla T) \quad (1)$$

siendo \mathbf{r} la densidad, c el calor específico, k la conductividad, T la temperatura, $\tilde{\nabla}$ el operador gradiente y el punto sobre una variable la derivada temporal. Para esta ecuación deben considerarse además las correspondientes condiciones iniciales y de contorno.

Si el proceso de enfriamiento está acompañado de fenómenos de cambio de fase, es preciso agregar un término a la ecuación (1) de manera que se obtiene

$$\mathbf{r} c \dot{T} + \mathbf{r} L \dot{f}_{pc} = \nabla \cdot (k \cdot \nabla T) \quad (2)$$

donde L es el calor latente específico correspondiente al cambio de fase y f_{pc} es la función de cambio de fase ($0 \leq f_{pc} \leq 1$).

Para el caso del proceso de solidificación la función de cambio de fase f_{pc} viene dada por $1-f_s$, siendo f_s la fracción sólida. En el análisis puramente macroscópico del cambio de fase, f_{pc} es una función explícita de la temperatura, siendo esta última la única variable de estado independiente del problema. Para este caso es posible reemplazar a

$$\dot{f}_{pc} \quad \text{por} \quad \frac{\partial f_{pc}}{\partial T} \dot{T}$$

Estos tipos de análisis no pueden predecir parámetros microestructurales de las diferentes fases que se forman en la pieza que solidifica, tales como tamaño de grano, espaciamiento eutéctico o dendrítico, tipo de microestructura y porcentajes, etc. Todos estos aspectos sólo pueden ser tenidos en cuenta a través de la formulación de un modelo microscópico.

Los diferentes modelos microscópicos que se han formulado para tratar el problema de solidificación de metales, normalmente, no dan la función de cambio de fase en forma

explícita, sino su variación temporal como función de las variaciones temporales de las distintas variables de estado independientes. En problemas de solidificación equiaxial, una posible opción se puede escribir:

$$\dot{f}_s = A_N \dot{N} + A_R \dot{r} \quad (3)$$

siendo N la densidad de nucleación, y r el radio promedio de grano (su derivada temporal es la velocidad de crecimiento).

Los distintos modelos difieren en las leyes adoptadas para la nucleación, que puede ser continua, simultánea, etc., y aquellas establecidas para el crecimiento de grano, que puede tener en cuenta o no la difusión del soluto, puede depender del sobreenfriamiento, etc. En la Sección 3 se describe el modelo microestructural propuesto en el presente trabajo detallando la expresión de la fracción sólida y las leyes de evolución de la densidad de nucleación y el radio promedio de grano.

La presente formulación térmica-microestructural puede verse como la combinación de dos problemas diferentes e interdependientes: por un lado tenemos el “problema macroscópico” regido por la ecuación de la energía, y por otro lado el “problema microscópico” gobernado por el modelo microestructural. Evidentemente ambos problemas están fuertemente acoplados y, en general, presentan un grado alto de no linealidad.

La resolución de dicha formulación se realiza en forma numérica a través de una discretización espacio-temporal llevada a cabo en el contexto de los métodos de elementos y diferencias finitas, respectivamente ²¹. Los problemas macro y microscópico se resuelven en forma fuertemente acoplada en la misma discretización espacio-temporal ²¹. En el modelo microestructural, sin embargo, se adoptan en este trabajo ciertas simplificaciones que desacoplan parcialmente las ecuaciones del mismo.

3 MODELO MICROESTRUCTURAL DE SOLIDIFICACIÓN

Se simula la solidificación equiaxial estable de una fundición dúctil de composición eutéctica según la teoría plurinodular. Se supone nucleación independiente de austenita y grafito y, además, crecimiento dendrítico de la austenita y esférico de los nódulos de grafito. Para simplificar el modelo ambos crecimientos se consideran desacoplados.

3.1 Concentraciones de equilibrio de carbono en las interfases

En la determinación de las concentraciones de carbono correspondientes al estado de equilibrio para cada temperatura, se tiene en cuenta la influencia del silicio considerando el diagrama de equilibrio ternario Fe-C-Si. Esto se logra usando un diagrama de equilibrio en dos dimensiones pero cuyas líneas de líquidus, sólidus y temperatura de equilibrio eutéctica están definidas por funciones que dependen del contenido de silicio (Si) y de carbono (C) de la fundición que solidifica de acuerdo a las expresiones ¹³:

$$T_{AL} = 1569 - 97.3 \left(C + \frac{1}{4} Si \right)$$

$$T_{AS} = 1528 - 177.9(C + 0.18Si)$$

$$T_{GL} = 389.1\left(C + \frac{1}{3}Si\right) - 503.2$$

$$T_E = 1154.6 + 6.5Si \quad (4)$$

El significado de las temperaturas T_{AL} , T_{AS} , T_{GL} y T_E , puede verse en el diagrama de equilibrio de la Figura 1.

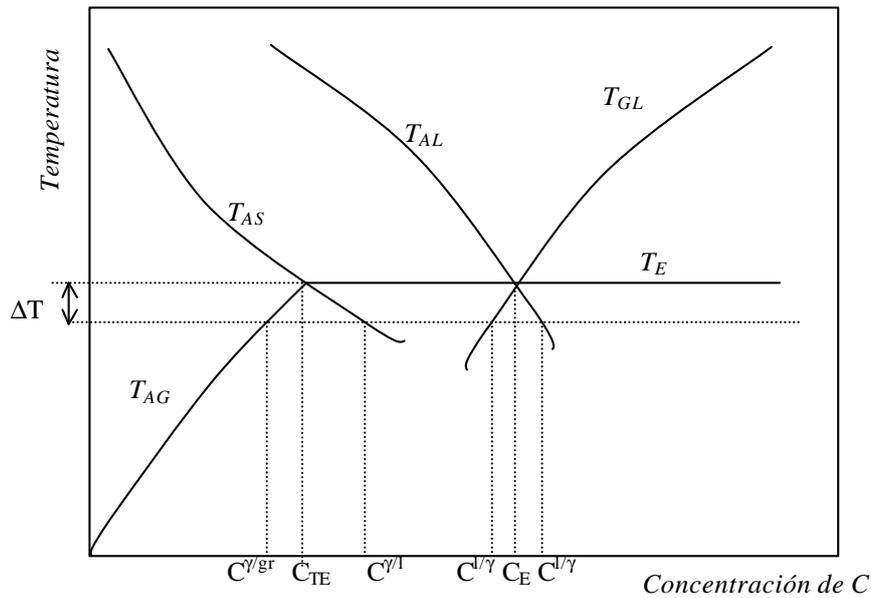


Figura 1: Esquema de la región eutéctica de un diagrama Fe-C-Si para un determinado porcentaje de Si.

Por intersección entre T_{AS} y T_E se obtiene el punto de máxima solubilidad de carbono en la austenita a temperatura eutéctica:

$$C_{TE} = 2.1 - 0.216Si \quad (5)$$

Por intersección entre T_{AL} y T_E se obtiene el contenido de carbono del eutéctico:

$$C_E = 4.26 - 0.317Si \quad (6)$$

De las ecuaciones anteriores se pueden despejar los porcentajes de carbono en la zona de la interfase correspondientes a cada fase y cada temperatura.

$$C^{l/g} = \frac{1}{97.3} (1569 - T - 24.32Si)$$

$$C^{g/l} = \frac{1}{177.9} (1528.4 - T - 32Si)$$

$$C_{gr}^{l} = \frac{1}{389.1}(T - 129.7Si + 503.2) \quad (7)$$

Para la definición de la línea T_{AG} , que determina la variación de la solubilidad del carbono en la austenita en estado sólido, se ubica el punto de coordenadas 800 °C y 0.6 % C, el cual se considera como el punto eutectoide, y se lo une con el punto C_{TE} , obteniéndose¹³:

$$C_{gr}^{g} = \frac{(T - 1154.6 - 6.5Si)(1.5 - 0.216Si)}{(354.6 + 6.5Si)} + 2.1 - 0.216Si \quad (8)$$

Como se puede ver en el diagrama de la Figura 1, las curvas se hacen continuar por debajo de la temperatura eutéctica, de manera que si la temperatura baja por debajo de dicha temperatura y todavía sigue la solidificación, se tienen en cuenta esas prolongaciones para calcular las concentraciones de carbono de las distintas fases en las interfases. Esto quiere decir que se considera que, en las interfases, se cumplen las condiciones de equilibrio, aunque no sea así en el resto del volumen de la fundición.

3.2 Crecimiento dendrítico equiaxial. Hipótesis básicas.

El crecimiento dendrítico ha sido analizado y simulado numéricamente por distintos investigadores²²⁻²⁴. Dicha simulación ha sido realizada en algunos casos a escala atómica, con lo cual sólo es posible la consideración de unas pocas ramas y, en otros casos, a escala microestructural desde un punto de vista fenomenológico, analizando promedios en pequeños volúmenes representativos, lo que hace posible (desde el punto de vista de capacidad de máquina) el acoplamiento de este análisis con cálculos términos y termo-mecánicos realizados a nivel macromecánico.

Para la simulación del crecimiento equiaxial dendrítico a nivel microestructural de la austenita y de la difusión del carbono utilizada en este trabajo se adoptan algunas de las principales consideraciones realizadas por M. Rappaz *et al.*^{22,23} que asume que un grano individual de crecimiento equiaxial dendrítico puede ser reemplazado por un grano esférico con un cierta fracción de volumen sólido interior. Las principales suposiciones propuestas por Rappaz son:

- La formación de la microestructura está controlada por la difusión del soluto.
- La temperatura en el grano es uniforme por lo que la concentración en la superficie dendrítica también lo es.
- Composición uniforme del líquido interdendrítico.
- Sin difusión del soluto en el sólido.
- Difusión esférica del soluto en el líquido intergranular.
- Velocidad de crecimiento de las puntas de las dendritas principales dada por la ecuación de la cinética de crecimiento de una dendrita aislada.

En la Figura 2.a se muestra el esquema de un grano creciendo en forma dendrítica equiaxial. Se señalan el radio total del grano R_T , calculado en el momento de la nucleación (instantánea), y el radio R_g que corresponde a una superficie esférica determinada por las puntas de las dendritas y que irá creciendo durante la solidificación hasta alcanzar el valor R_T .

En la Figura 2.b pueden distinguirse tres zonas, determinadas a los fines de realizar una descripción simplificada del perfil de concentración del soluto. La *zona 1* muestra la evolución del contenido de soluto en el sólido y ocupa la fracción del volumen total que corresponde al sólido, en la *zona 2* se aprecia la distribución, que se supone uniforme, del carbono en el líquido interdendrítico (esta zona ocupa la fracción del volumen total que corresponde a $\frac{4}{3} \pi (R_g^3 - R_n^3)$) y en la *zona 3* puede verse el perfil de concentración de soluto de la zona intergranular (la *zona 3* ocupa la fracción del volumen total que corresponde a $\frac{4}{3} \pi (R_T^3 - R_g^3)$).

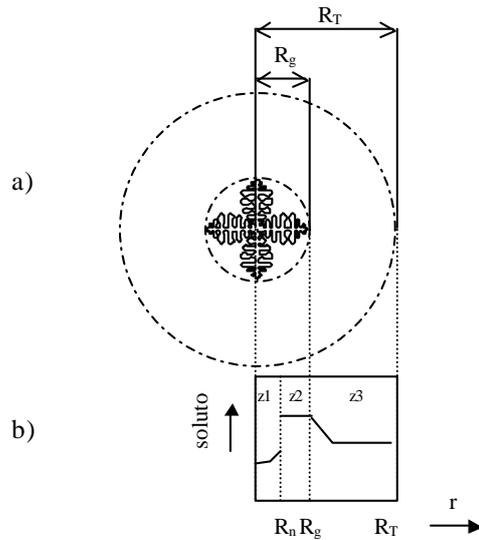


Figura 2: a) esquema de solidificación dendrítica equiaxial. b) perfil de concentración de soluto.

El esquema de la Figura 2 sería aplicable a la solidificación dendrítica equiaxial de la austenita primaria (sin solidificación de nódulos de grafito), sin embargo requiere modificaciones si se analiza la solidificación de una composición eutéctica en la que se producen simultáneamente la solidificación dendrítica de la austenita y la solidificación esférica de los nódulos de grafito que, evidentemente, modifican las fracciones de sólido y las concentraciones de soluto de cada zona.

Si bien el crecimiento de la austenita y el del grafito son simultáneos, para simplificar el modelo ambos procesos serán considerados secuenciales. En cada paso de tiempo, mientras se produce el crecimiento de la austenita, se considera constante la cantidad de grafito y cuando se produce el crecimiento del grafito se mantiene constante la cantidad de austenita. Después del crecimiento de cada fase, se recalculan las concentraciones de soluto en el líquido manteniendo siempre el balance de masa.

3.3 Cálculo de las fracciones que forman el volumen total del grano eutéctico.

En la Figura 3.a puede verse cómo estaría conformado el volumen total del grano, en el caso en que sólo solidificara austenita. Y en la Figura 3.b puede verse cómo estaría conformado el volumen total del grano en el caso de la solidificación de una fundición de

composición eutéctica, en la que además de la austenita creciendo en forma dendrítica existen nódulos de grafito distribuidos en la totalidad del volumen de grano. En las Figuras 3.a y b el rectángulo exterior representa la totalidad del volumen del grano, éste se divide en tres zonas, $z1$, $z2$ y $z3$. En el caso de la Figura 3.b, la *zona 1* está compuesta por austenita y grafito ya rodeado de austenita, la *zona 2* por líquido interdendrítico y grafito y la *zona 3* por líquido intergranular y grafito.

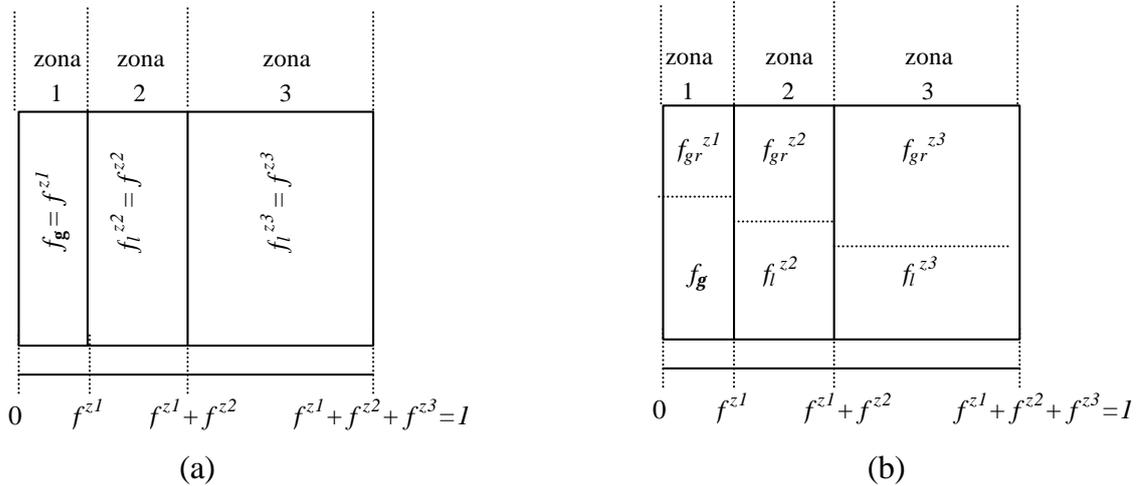


Figura 3: a) fracciones que componen el grano equiaxial dendrítico en la solidificación de una sola fase. b) fracciones que componen el grano equiaxial en la solidificación de la fundición dúctil de composición eutéctica.

Las ecuaciones 9 a 12 permiten el cálculo de las fracciones indicadas en la Figura 3.b

$$f^{z1} = \frac{R_n^3}{R_T^3} = f_g + f_{gr}^{z1}$$

$$f^{z2} = \frac{(R_g^3 - R_n^3)}{R_T^3} = f_l^{z2} + f_{gr}^{z2}$$

$$f^{z3} = \frac{(R_r^3 - R_g^3)}{R_T^3} = f_l^{z3} + f_{gr}^{z3} \quad (9)$$

siendo:

- f^{z1} : la fracción del volumen total que ocupa la *zona 1*
- f^{z2} : la fracción del volumen total que ocupa la *zona 2*
- f^{z3} : la fracción del volumen total que ocupa la *zona 3*

$$f_g = \frac{R_n^3}{R_T^3} - f_{gr}^{z1} = f^{z1} - f_{gr}^{z1}$$

$$f_g = \frac{R_g^3}{R_T^3} = f^{z1} + f^{z2} \quad (10)$$

siendo:

f_g : la fracción del volumen total que ocupa la esfera que envuelve al grano de austenita

f_g : la fracción del volumen total que ocupa la austenita

$$f_{gr}^{z1} = \frac{\sum_{j=1}^k N_{gr\ j}^{z1} R_{gr\ j}^3}{R_T^3} = \frac{4}{3} p \sum_{j=1}^k N_{gr\ j}^{z1} R_{gr\ j}^3$$

$$f_{gr}^{z2} = \frac{\sum_{j=1}^k N_{gr\ j}^{z2} R_{gr\ j}^3}{R_T^3} = \frac{4}{3} p \sum_{j=1}^k N_{gr\ j}^{z2} R_{gr\ j}^3$$

$$f_{gr}^{z3} = \frac{\sum_{j=1}^k N_{gr\ j}^{z3} R_{gr\ j}^3}{R_T^3} = \frac{4}{3} p \sum_{j=1}^k N_{gr\ j}^{z3} R_{gr\ j}^3 \quad (11)$$

siendo:

f_{gr}^{z1} : la fracción del volumen total que ocupa el grafito de la zona 1 (ya rodeado por austenita)

f_{gr}^{z2} : la fracción del volumen total que ocupa el grafito de la zona 2 (interdendrítica)

f_{gr}^{z3} : la fracción del volumen total que ocupa el grafito de la zona 3 (intergranular)

La fracción sólida puede expresarse como lo indica la siguiente expresión

$$f_s = f_g + f_{gr}^{z1} + f_{gr}^{z2} + f_{gr}^{z3} \quad (12)$$

$$= f^{z1} + f_{gr}^{z2} + f_{gr}^{z3}$$

3.4 Nucleación y tamaño de grano de la austenita eutéctica

Se considera que la nucleación de la austenita es instantánea y se produce cuando se alcanza la temperatura eutéctica T_E .

Las pruebas experimentales demuestran que, cuando la velocidad de enfriamiento es mayor, aumenta el número de granos, esto es debido a que se alcanza un mayor sobreenfriamiento ($DT = T_E - T$), lo contrario ocurre para velocidades de enfriamiento menores. Dado que se modela una nucleación instantánea de la austenita, no es posible expresar la densidad de grano en función del sobreenfriamiento, por lo tanto se propone, como una aproximación, una función lineal de la velocidad de enfriamiento que se produce en el paso de tiempo en que la temperatura desciende por debajo de T_E .

$$N_g = A \, dT/dt \quad (13)$$

siendo N_g la densidad de granos de austenita (nº granos por unidad de volumen) y A un parámetro que depende de las características del tratamiento del líquido, tales como inoculación, temperatura máxima, tiempo durante el cuál se mantiene el líquido a la temperatura máxima, etc..

Dado que se simula una solidificación de tipo equiaxial, por simplicidad se considerará que la forma final de los granos es esférica y de radio R_T .

En base a la cantidad de granos de austenita que nuclean por unidad de volumen, se determina el radio total R_T de los mismos en cada punto, considerándose constante durante todo el proceso. En cada volumen representativo encontraremos un solo tamaño de grano de austenita cuyo radio está dado por la fórmula

$$R_T = \sqrt[3]{\frac{3}{4\pi N_g}} \quad (14)$$

Si bien el volumen de un grano puede establecerse con la fórmula 14, no es cierto que los granos sean esferas perfectas de radio R_T ya que, si así fuera, se producirían zonas de interferencia y/o zonas vacías. Ver Figura 4.

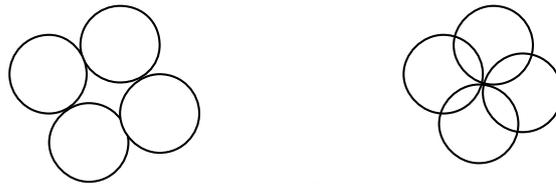


Figura 4

Considerando que los granos son esferas perfectas de radio R_T , calculado con la fórmula 14, se asegura la consideración exacta de todo el volumen, sin embargo, no se tiene en cuenta la interferencia de las esferas entre sí, que podría producir una disminución de la velocidad de crecimiento en los puntos en los que se produce la interacción. De todos modos se debe tener en cuenta que la interferencia no se produce necesariamente al mismo tiempo en todos los puntos de la superficie externa de la esfera y que, además, los granos no son esferas sólidas sino que crecen de manera dendrítica

3.5 Nucleación de los nódulos de grafito

La nucleación del grafito se simula continua, por lo que en cada paso de tiempo Dt , cuando la temperatura esté por debajo de la temperatura eutéctica y hasta que se produzca la recalescencia, nucleará un conjunto de nódulos con una determinada densidad N_{grj} , siendo j el índice que indica de qué conjunto de nucleación se trata. Parte de los nódulos nuclearán en el líquido interdendrítico de la zona 2 ($R_n < r < R_g$) y parte en el líquido intergranular de la zona 3 ($r > R_g$). Cada vez que un grupo de nódulos nuclea, se establece su distribución entre las dos zonas, salvo en el primer paso de tiempo en el que la temperatura desciende por

debajo de la eutéctica, que es en el que también nuclea la austenita, y en el que se considerará la totalidad de los nódulos ubicados en la *zona 3* (no existe *zona 2*).

Para la nucleación del grafito se usará la siguiente fórmula exponencial¹³

$$\frac{\partial N_{gr}}{\partial t} = b\Delta T \exp\left(-\frac{c}{\Delta T}\right)(1 - fs) \quad (15)$$

donde b y c son parámetros constantes para una determinada composición y tratamiento del líquido. El factor $(1 - fs)$, donde fs es la fracción sólida, permite tener en cuenta la disminución de la fracción líquida, esto es importante ya que la densidad está expresada con respecto al volumen total.

Los nódulos de grafito nuclean en las zonas líquidas del grano y, para cada paso de tiempo y grupo de nucleación j , se verifica que

$$N_{gr\ j}^{\circ} = N_{gr\ j}^{\circ\ z2} + N_{gr\ j}^{\circ\ z3} \quad (16)$$

Siendo $N_{gr\ j}^{\circ}$ el número total de nódulos que nuclea, $N_{gr\ j}^{\circ\ z2}$ número de nódulos que nuclea en el líquido interdendrítico (líquido de la *zona 2*) y $N_{gr\ j}^{\circ\ z3}$ número de nódulos que nuclea en el líquido exterior o intergranular (líquido de la *zona 3*).

Dado que el número de nódulos es igual a la densidad de nódulos multiplicada por el volumen total del grano, se puede expresar que la densidad total de nodulos correspondiente al grupo de nucleación j , en el momento de la nucleación, es igual a la suma de las densidades de nódulos de la *zona 2* y de la *zona 3* en el mismo instante de nucleación y para al mismo grupo j , según lo expresa la ecuación 17.

$$N_{gr\ j} \times V_T = N_{gr\ j}^{z2} \times V_T + N_{gr\ j}^{z3} \times V_T$$

$$N_{gr\ j} = N_{gr\ j}^{z2} + N_{gr\ j}^{z3} \quad (17)$$

Usando la ley de nucleación de la fórmula 15,

$$b\Delta T \exp\left(\frac{-c}{\Delta T}\right)(1 - f_s) \Delta t = b\Delta T \exp\left(\frac{-c}{\Delta T}\right)(f_l^{z2} + f_l^{z3}) \Delta t$$

$$= b\Delta T \exp\left(\frac{-c}{\Delta T}\right) f_l^{z2} \Delta t + b\Delta T \exp\left(\frac{-c}{\Delta T}\right) f_l^{z3} \Delta t \quad (18)$$

La distribución de las nuevas nucleaciones viene dada por las siguientes fórmulas

$$N_{gr\ j}^{z2} = \left[b\Delta T \exp\left(\frac{-c}{\Delta T}\right)(1 - f^{z1} - f_{gr}^{z2} - f^{z3}) \Delta t \right]_j$$

$$N_{gr\ j}^{z3} = \left[b\Delta T \exp\left(\frac{-c}{\Delta T}\right)(1 - f_g - f_{gr}^{z3}) \Delta t \right]_j \quad (19)$$

3.6 Crecimiento de la austenita

En un modelo en el que crece sólo austenita, el perfil de concentración de carbono se vería tal como lo muestra la Figura 2.b, sin embargo, si se consideran los nódulos de grafito distribuidos en el volumen del grano, el perfil de soluto podría esquematizarse como se ve en la Figura 5.a, en la que la concentración presenta discontinuidades ocasionadas por la presencia de los nódulos que poseen un porcentaje de carbono de 100%.

En la figura 5.b se ve un esquema del perfil de concentraciones simplificado, en el que se considera una concentración uniforme de carbono C_{pro} , en el líquido de la zona 3. La obtención de C_{pro} a partir de $C^{l/g}$, $C_{\gamma g}$ y d , manteniendo el balance de masa, se detalla más adelante.

Para la determinación de la velocidad de crecimiento de la punta de las dendritas principales DR_g/Dt , se usará el perfil de concentraciones que muestra la Figura 5.a, y para el cálculo del crecimiento de la austenita de la zona 1 se considerará el perfil simplificado de la Figura 5.b, cuidando siempre de mantener el balance de masa.

Si bien los granos de austenita y los nódulos de grafito crecen simultáneamente, en el modelo que se propone estos crecimientos se consideran desacoplados, cuando se calcula el crecimiento de la austenita se considera constante el número y tamaño de los nódulos de grafito y viceversa.

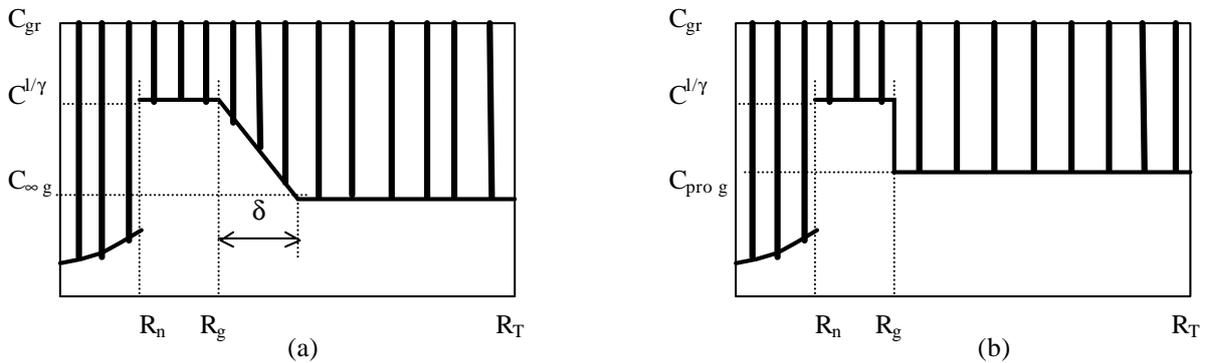


Figura 5: a) perfil de concentración de carbono considerando capa límite. b) perfil de concentración de carbono considerando concentración uniforme en zona 3

a) Cinética de crecimiento de la punta de la dendrita

El crecimiento de la punta de la dendrita se considera controlado enteramente por la difusión del soluto y se desprecia el sobreenfriamiento térmico. Para la velocidad de crecimiento de la punta de la dendrita se usará la fórmula 20^{22,23}

$$\frac{dR_g}{dt} = \frac{D m C_0}{p^2 \Gamma (k-1)} \left(\frac{C^{l/g} - C_{\infty g}}{C_0} \right)^2 \quad (20)$$

Siendo D el coeficiente de difusión del carbono en el líquido, m la pendiente de la línea de líquidus T_{AL} , G el coeficiente de Gibbs-Thompson, C_0 la concentración de carbono inicial y k coeficiente de partición que relaciona las concentraciones de sólido y líquido en equilibrio. C_{γ_g} es la concentración de carbono en el líquido intergranular fuera de la zona límite d y después del crecimiento del grafito (su cálculo se verá más adelante). Ver Figura 5.a.

b) Crecimiento de R_n debido a la solidificación de la austenita

La Figura 6, en la que no se representa la concentración de los nódulos de grafito para mayor simplicidad, muestra la variación del perfil de concentraciones de carbono en un paso de tiempo. Las concentraciones y radios sin comillas corresponden a un tiempo t y los que tienen comillas corresponden a un tiempo $t + Dt$.

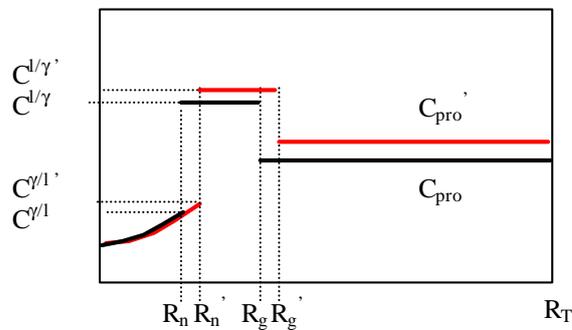


Figura 6: variación del perfil de concentración de carbono en un paso de tiempo

Considerando una distribución continua (no discreta) del volumen de carbono de los nódulos de grafito en el volumen del grano, se calcula

$$U_{gr}^{z1} = \frac{4}{3} \rho \sum_{j=1}^k N_{gr j}^{z1} R_{gr j}^3 / V_{z1} = f_{gr}^{z1} / f^{z1}$$

$$U_{gr}^{z2} = \frac{4}{3} \rho \sum_{j=1}^k N_{gr j}^{z2} R_{gr j}^3 / V_{z2} = f_{gr}^{z2} / f^{z2}$$

$$U_{gr}^{z3} = \frac{4}{3} \rho \sum_{j=1}^k N_{gr j}^{z3} R_{gr j}^3 / V_{z3} = f_{gr}^{z3} / f^{z3} \quad (21)$$

La distribución de la masa total de carbono en un tiempo $t + Dt$ es

$$\begin{aligned}
 & \int_0^{R_n} k C^{l/g}(r) [1 - U_{gr}^{z1}] 4\mathbf{p} \mathbf{r}_g r^2 dr + \int_0^{R_n} C_{gr} U_{gr}^{z1} 4\mathbf{p} \mathbf{r}_{gr} r^2 dr + \\
 & + \int_{R_n}^{R_n'} k C^{l/g}(r) [1 - U_{gr}^{z2}] 4\mathbf{p} \mathbf{r}_g r^2 dr + \int_{R_n}^{R_n'} C_{gr} U_{gr}^{z2} 4\mathbf{p} \mathbf{r}_{gr} r^2 dr + \\
 & + \int_{R_n}^{R_g} C^{l/g'} [1 - U_{gr}^{z2}] 4\mathbf{p} \mathbf{r}_g r^2 dr + \int_{R_n}^{R_g} C_{gr} U_{gr}^{z2} 4\mathbf{p} \mathbf{r}_{gr} r^2 dr + \\
 & + \int_{R_g}^{R_g'} C^{l/g'} [1 - U_{gr}^{z3}] 4\mathbf{p} \mathbf{r}_g r^2 dr + \int_{R_g}^{R_g'} C_{gr} U_{gr}^{z3} 4\mathbf{p} \mathbf{r}_{gr} r^2 dr + \\
 & + \int_{R_g}^{R_T} C_{pro} [1 - U_{gr}^{z3}] 4\mathbf{p} \mathbf{r}_g r^2 dr + \int_{R_g}^{R_T} C_{gr} U_{gr}^{z3} 4\mathbf{p} \mathbf{r}_{gr} r^2 dr = C_0 \mathbf{r}_g \frac{4}{3} \mathbf{p} R_T^3
 \end{aligned} \tag{22}$$

mientras que en un tiempo t la distribución de la masa total de soluto es

$$\begin{aligned}
 & \int_0^{R_n} k C^{l/g}(r) [1 - U_{gr}^{z1}] 4\mathbf{p} \mathbf{r}_g r^2 dr + \int_0^{R_n} C_{gr} U_{gr}^{z1} 4\mathbf{p} \mathbf{r}_{gr} r^2 dr + \\
 & + \int_{R_n}^{R_n'} C^{l/g} [1 - U_{gr}^{z2}] 4\mathbf{p} \mathbf{r}_g r^2 dr + \int_{R_n}^{R_n'} C_{gr} U_{gr}^{z2} 4\mathbf{p} \mathbf{r}_{gr} r^2 dr + \\
 & + \int_{R_n}^{R_g} C^{l/g} [1 - U_{gr}^{z2}] 4\mathbf{p} \mathbf{r}_g r^2 dr + \int_{R_n}^{R_g} C_{gr} U_{gr}^{z2} 4\mathbf{p} \mathbf{r}_{gr} r^2 dr + \\
 & + \int_{R_g}^{R_g'} C_{pro} [1 - U_{gr}^{z3}] 4\mathbf{p} \mathbf{r}_g r^2 dr + \int_{R_g}^{R_g'} C_{gr} U_{gr}^{z3} 4\mathbf{p} \mathbf{r}_{gr} r^2 dr + \\
 & + \int_{R_g}^{R_T} C_{pro} [1 - U_{gr}^{z3}] 4\mathbf{p} \mathbf{r}_g r^2 dr + \int_{R_g}^{R_T} C_{gr} U_{gr}^{z3} 4\mathbf{p} \mathbf{r}_{gr} r^2 dr = C_0 \mathbf{r}_g \frac{4}{3} \mathbf{p} R_T^3
 \end{aligned} \tag{23}$$

Restando la ecuación 23 a la 22 se obtiene

$$\begin{aligned}
 & \int_{R_n}^{R_n'} k C^{l/g}(r) [1 - U_{gr}^{z2}] 4\mathbf{p} \mathbf{r}_g r^2 dr + \int_{R_n}^{R_g} C^{l/g'} [1 - U_{gr}^{z2}] 4\mathbf{p} \mathbf{r}_g r^2 dr \\
 & + \int_{R_g}^{R_g'} C^{l/g'} [1 - U_{gr}^{z3}] 4\mathbf{p} \mathbf{r}_g r^2 dr + \int_{R_g}^{R_T} C_{pro} [1 - U_{gr}^{z3}] 4\mathbf{p} \mathbf{r}_g r^2 dr - \\
 & - \int_{R_n}^{R_n'} C^{l/g} [1 - U_{gr}^{z2}] 4\mathbf{p} \mathbf{r}_g r^2 dr - \int_{R_n}^{R_g} C^{l/g} [1 - U_{gr}^{z2}] 4\mathbf{p} \mathbf{r}_g r^2 dr - \\
 & - \int_{R_g}^{R_g'} C_{pro} [1 - U_{gr}^{z3}] 4\mathbf{p} \mathbf{r}_g r^2 dr - \int_{R_g}^{R_T} C_{pro} [1 - U_{gr}^{z3}] 4\mathbf{p} \mathbf{r}_g r^2 dr = 0
 \end{aligned} \tag{24}$$

Sumando y restando términos iguales en la ecuación 24, con el fin de adecuar mejor los límites de integración pero sin modificar la igualdad, se obtiene

$$\begin{aligned}
 & \int_{R_n}^{R_n'} k C^{l/g}(r) [1-U_{gr}^{z2}] 4\mathbf{p} \mathbf{r}_g r^2 dr + \int_{R_n}^{R_g'} C^{l/g'} [1-U_{gr}^{z2}] 4\mathbf{p} \mathbf{r}_g r^2 dr + \\
 & + \int_{R_g}^{R_g'} C^{l/g'} [1-U_{gr}^{z3}] 4\mathbf{p} \mathbf{r}_g r^2 dr + \int_{R_g}^{R_T'} C_{pro}' [1-U_{gr}^{z3}] 4\mathbf{p} \mathbf{r}_g r^2 dr - \\
 & - \int_{R_n}^{R_n'} C^{l/g} [1-U_{gr}^{z2}] 4\mathbf{p} \mathbf{r}_g r^2 dr - \int_{R_n}^{R_g} C^{l/g} [1-U_{gr}^{z2}] 4\mathbf{p} \mathbf{r}_g r^2 dr - \\
 & - \int_{R_g}^{R_g'} C_{pro} [1-U_{gr}^{z3}] 4\mathbf{p} \mathbf{r}_g r^2 dr - \int_{R_g}^{R_T} C_{pro} [1-U_{gr}^{z3}] 4\mathbf{p} \mathbf{r}_g r^2 dr + \\
 & + \int_{R_n}^{R_n'} C^{l/g'} [1-U_{gr}^{z2}] 4\mathbf{p} \mathbf{r}_g r^2 dr - \int_{R_n}^{R_n'} C^{l/g'} [1-U_{gr}^{z2}] 4\mathbf{p} \mathbf{r}_g r^2 dr + \\
 & + \int_{R_n}^{R_n'} C^{l/g} [1-U_{gr}^{z2}] 4\mathbf{p} \mathbf{r}_g r^2 dr - \int_{R_n}^{R_n'} C^{l/g} [1-U_{gr}^{z2}] 4\mathbf{p} \mathbf{r}_g r^2 dr = 0
 \end{aligned} \tag{25}$$

Reacomodando y considerando además que $k C^{l/g}$ es constante (lo que se aproximaría más a la realidad cuando más pequeño sea Dt)

$$\begin{aligned}
 & \int_{R_n}^{R_n'} [k-1] C^{l/g} [1-U_{gr}^{z2}] 4\mathbf{p} r^2 dr + \int_{R_n}^{R_g} [C^{l/g'} - C^{l/g}] [1-U_{gr}^{z2}] 4\mathbf{p} r^2 dr + \\
 & + \int_{R_g}^{R_g'} [C^{l/g'} - C_{pro}] [1-U_{gr}^{z3}] 4\mathbf{p} r^2 dr + \int_{R_g}^{R_T} [C_{pro}' - C_{pro}] [1-U_{gr}^{z3}] 4\mathbf{p} r^2 dr \\
 & + \int_{R_n}^{R_n'} [C^{l/g} - C^{l/g'}] [1-U_{gr}^{z2}] 4\mathbf{p} r^2 dr = 0
 \end{aligned} \tag{26}$$

Resolviendo las integrales y despreciando los términos de orden superior en DR_n

- a) $\int_{R_n}^{R_n'} [k-1] C^{l/g} [1-U_{gr}^{z2}] 4\mathbf{p} r^2 dr = [k-1] C^{l/g} [1-U_{gr}^{z2}] \frac{4}{3} \mathbf{p} R_n^2 \Delta R_n$
- b) $\int_{R_n}^{R_g} [C^{l/g'} - C^{l/g}] [1-U_{gr}^{z2}] 4\mathbf{p} r^2 dr = \Delta C^{l/g} [1-U_{gr}^{z2}] \frac{4}{3} \mathbf{p} [R_g^3 - R_n^3]$
- c) $\int_{R_g}^{R_g'} [C^{l/g'} - C_{pro}] [1-U_{gr}^{z3}] 4\mathbf{p} r^2 dr = [C^{l/g'} - C_{pro}] [1-U_{gr}^{z3}] \frac{4}{3} \mathbf{p} [R_g'^3 - R_g^3]$
- d) $\int_{R_g}^{R_T} [C_{pro}' - C_{pro}] [1-U_{gr}^{z3}] 4\mathbf{p} r^2 dr = [C_{pro}' - C_{pro}] [1-U_{gr}^{z3}] \frac{4}{3} \mathbf{p} [R_T^3 - R_g^3]$
- e) $\int_{R_n}^{R_n'} [C^{l/g} - C^{l/g'}] [1-U_{gr}^{z2}] 4\mathbf{p} r^2 dr = [C^{l/g} - C^{l/g'}] [1-U_{gr}^{z2}] \frac{4}{3} \mathbf{p} R_n^2 \Delta R_n$

La expresión final es

$$\begin{aligned}
 & [k-1] C^{l/g} [1-U_{gr}^{z2}] \frac{4}{3} \mathbf{p} R_n^2 \Delta R_n + \Delta C^{l/g} [1-U_{gr}^{z2}] \frac{4}{3} \mathbf{p} [R_g^3 - R_n^3] + \\
 & + [C^{l/g'} - C_{pro}] [1-U_{gr}^{z3}] \frac{4}{3} \mathbf{p} [R_g'^3 - R_g^3] + [C_{pro}' - C_{pro}] [1-U_{gr}^{z3}] \frac{4}{3} \mathbf{p} [R_T^3 - R_g'^3] + \quad (27) \\
 & + [C^{l/g} - C^{l/g'}] [1-U_{gr}^{z2}] \frac{4}{3} \mathbf{p} R_n^2 \Delta R_n = 0
 \end{aligned}$$

En la ecuación 27 no se conocen DR_n ni C_{pro}' , pero es posible reemplazar los términos resultantes de las integrales de la zona $r > R_g$ por el flujo de carbono en R_g . Para el cálculo de dicho flujo se usa como espesor de la capa límite d el que se obtiene para un frente plano²³⁻²⁵

$$\mathbf{d} = \frac{2D}{\frac{\Delta R_g}{\Delta t}} \quad (28)$$

El gradiente en R_g se tomará como²³⁻²⁵

$$\left. \frac{dC}{dr} \right|_{r=R_g} = \frac{C^{l/g} - C_{\infty g}}{\mathbf{d}/2} \quad (29)$$

Por lo tanto

$$\begin{aligned}
 -4\mathbf{p} DR_g^2 \left. \frac{dc}{dr} \right|_{r=R_g} \Delta t &= [k-1] C^{l/g} [1-U_{gr}^{z2}] \frac{4}{3} \mathbf{p} R_n^2 \Delta R_n + \Delta C^{l/g} [1-U_{gr}^{z2}] \frac{4}{3} \mathbf{p} [R_g^3 - R_n^3] + \\
 &+ [C^{l/g} - C^{l/g'}] [1-U_{gr}^{z2}] \frac{4}{3} \mathbf{p} R_n^2 \Delta R_n \\
 -4\mathbf{p} DR_g^2 \left. \frac{dc}{dr} \right|_{r=R_g} \Delta t &= \{ [k-1] C^{l/g} - \Delta C^{l/g} \} [1-U_{gr}^{z2}] \frac{4}{3} \mathbf{p} R_n^2 \Delta R_n + \\
 &+ \Delta C^{l/g} [1-U_{gr}^{z2}] \frac{4}{3} \mathbf{p} [R_g^3 - R_n^3] \quad (30)
 \end{aligned}$$

Despejando la incógnita DR_n

$$\Delta R_n = \frac{4\mathbf{p} DR_g^2 \left. \frac{dc}{dr} \right|_{r=R_g} \Delta t + \Delta C^{l/g} [1-U_{gr}^{z2}] \frac{4}{3} \mathbf{p} [R_g^3 - R_n^3]}{\{ [1-k] C^{l/g} + \Delta C^{l/g} \} [1-U_{gr}^{z2}] \frac{4}{3} \mathbf{p} R_n^2} \quad (31)$$

Con el flujo de carbono en el límite R_g también se puede calcular C_{pro}' , según lo muestra la expresión 32

$$3 DR_g^2 \frac{dc}{dr} \Big|_{r=R_g} \Delta t = [C^{l/g'} - C_{pro}][1 - U_{gr}^{z3}] [R_g'^3 - R_g^3] + [C_{pro}' - C_{pro}][1 - U_{gr}^{z3}] [R_T^3 - R_g^3]$$

$$C_{pro}' = \frac{3 DR_g^2 \frac{dc}{dr} \Big|_{r=R_g} \Delta t}{[1 - U_{gr}^{z3}] [R_T^3 - R_g^3]} - \frac{[C^{l/g'} - C_{pro}][R_g'^3 - R_g^3]}{[R_T^3 - R_g^3]} + C_{pro} \quad (32)$$

3.7 Distribución de los nódulos ya existentes

Cuando se produce el crecimiento de los radios R_g y R_n (Figura 7), hay un cierto número de nódulos que pasan de la zona 3 a la zona 2 y de la zona 2 a la zona 1.

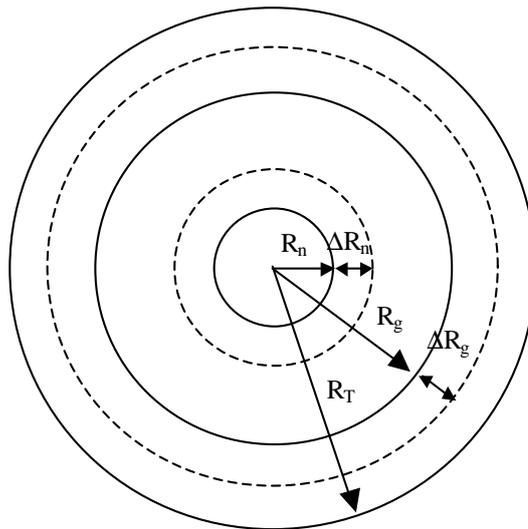


Figura 7: variación de los radios R_n y R_g en un paso de tiempo.

Sabiendo que

$$\sum_{j=1}^k N_{grj}^{z1} \times V_T + \sum_{j=1}^k N_{grj}^{z2} \times V_T + \sum_{j=1}^k N_{grj}^{z3} \times V_T = \sum_{j=1}^k N_{grj} \times V_T \quad (33)$$

Para cada grupo de nódulos j , antes y después del crecimiento de R_n y R_g , y sin tener en cuenta nuevas nucleaciones se cumple

$${}^i N_{grj}^{z1} \times V_T + {}^i N_{grj}^{z2} \times V_T + {}^i N_{grj}^{z3} \times V = N_{grj} \times V_T \quad \text{estado inicial}$$

$${}^f N_{grj}^{z1} \times V_T + {}^f N_{grj}^{z2} \times V_T + {}^f N_{grj}^{z3} \times V = N_{grj} \times V_T \quad \text{estado final}$$

Restando las expresiones anteriores se obtiene

$$\Delta N_{grj}^{z1} \times V_T + \Delta N_{grj}^{z2} \times V_T + \Delta N_{grj}^{z3} \times V_T = 0 \quad (34)$$

Para obtener la densidad de nódulos de las zonas $z1$, $z2$ y $z3$, por unidad de volumen de las zonas $z1$, $z2$ y $z3$ respectivamente (y no del volumen total)

$$\frac{N_{grj}^{z1}}{\frac{4}{3}\mathbf{p}R_n^3} = \frac{N_{grj}^{z1} \times \frac{4}{3}\mathbf{p}R_T^3}{\frac{4}{3}\mathbf{p}R_n^3} = \frac{N_{grj}^{z1}}{f^{z1}}$$

$$\frac{N_{grj}^{z3}}{\frac{4}{3}\mathbf{p}(R_T^3 - R_g^3)} = \frac{N_{grj}^{z3} \times \frac{4}{3}\mathbf{p}R_T^3}{\frac{4}{3}\mathbf{p}(R_T^3 - R_g^3)} = \frac{N_{grj}^{z3}}{f^{z3}}$$

$$\frac{N_{grj}^{z2}}{\frac{4}{3}\mathbf{p}(R_g^3 - R_n^3)} = \frac{N_{grj}^{z2} \times \frac{4}{3}\mathbf{p}R_T^3}{\frac{4}{3}\mathbf{p}(R_g^3 - R_n^3)} = \frac{N_{grj}^{z2}}{f^{z2}} \quad (35)$$

Las variaciones de volumen debidas a los incrementos de R_n y R_g son

$$\Delta V_n = \frac{4}{3}\mathbf{p} \left[(R_n + \Delta R_n)^3 - R_n^3 \right]$$

$$\Delta V_g = \frac{4}{3}\mathbf{p} \left[(R_g + \Delta R_g)^3 - R_g^3 \right] \quad (36)$$

Las variaciones del número de nódulos en cada zona es

$$\Delta N_{grj}^{z1} = \frac{N_{grj}^{z2}}{f^{z2}} \times \Delta V_n$$

$$\Delta N_{grj}^{z2} = \frac{N_{grj}^{z3}}{f^{z3}} \times \Delta V_g - \frac{N_{grj}^{z2}}{f^{z2}} \times \Delta V_n$$

$$\Delta N_{grj}^{z3} = -\frac{N_{grj}^{z3}}{f^{z3}} \times \Delta V_g \quad (37)$$

Las densidades finales en cada zona de cada grupo j en el paso de tiempo considerado son

$${}^f N_{grj}^{z1} = {}^i N_{grj}^{z1} + \frac{\Delta N_{grj}^{z1}}{V_T}$$

$$\begin{aligned}
 {}^f N_{gr\ j}^{z2} &= {}^i N_{gr\ j}^{z2} + \frac{\Delta N_{gr\ j}^{z2}}{V_T} \\
 {}^f N_{gr\ j}^{z3} &= {}^i N_{gr\ j}^{z3} + \frac{\Delta N_{gr\ j}^{z3}}{V_T}
 \end{aligned}
 \tag{38}$$

3.8 Crecimiento de los nódulos de grafito en el líquido

Los nódulos de grafito crecen tanto en el líquido interdendrítico como en el líquido intergranular, pero las leyes de crecimiento difieren, debido a que las concentraciones del líquido en las zonas 2 y 3 son distintas, $C^{l/g}$ y C_{pro} respectivamente. Para los nódulos ubicados en la zona 1 se considera velocidad de crecimiento nula.

Para los nódulos de cada grupo j , se calcula una velocidad de crecimiento que es un promedio ponderado de las velocidades de crecimiento de los nódulos de dicho grupo j en las tres zonas y, con esta velocidad se obtiene un crecimiento promedio de los nódulos de cada grupo considerado.

En el entorno de los nódulos de grafito el perfil de concentración de soluto presenta una forma como la de la Figura 8

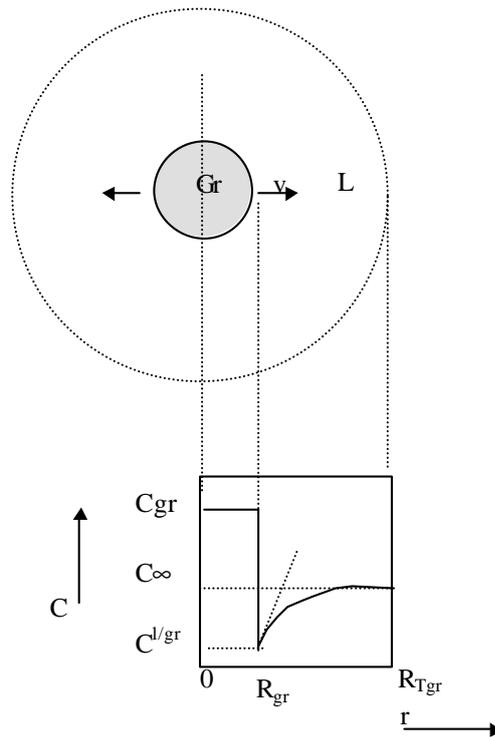


Figura 8: perfil de concentración de carbono durante el crecimiento de un nódulo de grafito.

Siguiendo la descripción de Kurz *et al.*²⁵, para el campo de difusión alrededor de una partícula esférica en crecimiento en un estado estacionario, el gradiente de concentración en R_{gr} puede expresarse como

$$\left. \frac{dC}{dr} \right|_{r=R_{gr}} = \frac{C_{\infty} - C^{l/gr}}{R_{gr}} \quad (39)$$

a) *Crecimiento del grafito en la zona 3*

Considerando que el gradiente de concentración de soluto en R_{gr} , calculado con la fórmula 39, ocasiona un flujo de carbono desde el líquido hacia el nódulo a través de la superficie exterior del mismo, que produce su crecimiento, se puede hallar la velocidad de crecimiento del grafito a partir del planteo de balance de masa tal como lo muestra la fórmula 40

$$D \frac{(C_{pro} - C^{l/gr})}{R_{gr}} \mathbf{r}_l \cdot 4\mathbf{p} R_{gr}^2 = 4\mathbf{p} R_{gr}^2 \frac{dR_{gr}}{dt} C_{gr} \mathbf{r}_{gr} - 4\mathbf{p} R_{gr}^2 \frac{dR_{gr}}{dt} C^{l/gr} \mathbf{r}_l$$

$$\frac{dR_{gr}}{dt} = \frac{D(C_{pro} - C^{l/gr}) \mathbf{r}_l}{R_{gr} (C_{gr} \mathbf{r}_{gr} - C^{l/gr} \mathbf{r}_l)} \quad (40)$$

Una vez que se produjo el crecimiento de los nódulos de grafito de la *zona 3* se calcula la nueva concentración de carbono en el líquido C_{pro}'' , considerando que ésta es uniforme.

El cálculo se hace planteando balance de masa de soluto entre los estados anterior y posterior al crecimiento de los nódulos

$$\int_{R_g}^{R_r} C_{pro} [1 - U_{gr}^{z3}] 4\mathbf{p} \mathbf{r}_g r^2 dr + \int_{R_g}^{R_r} C_{gr} U_{gr}^{z3} 4\mathbf{p} \mathbf{r}_{gr} r^2 dr =$$

$$= \int_{R_g}^{R_r} C_{pro}'' [1 - U_{gr}^{z3}'] 4\mathbf{p} \mathbf{r}_g r^2 dr + \int_{R_g}^{R_r} C_{gr} U_{gr}^{z3}' 4\mathbf{p} \mathbf{r}_{gr} r^2 dr \quad (41)$$

Integrando y despejando C_{pro}'' se obtiene

$$C_{pro}'' = \frac{C_{pro} (1 - U_{gr}^{z3}) \mathbf{r}_g + C_{gr} (U_{gr}^{z3} - U_{gr}^{z3}') \mathbf{r}_{gr}}{(1 - U_{gr}^{z3}') \mathbf{r}_g} \quad (42)$$

b) *Crecimiento del grafito en la zona 2*

La velocidad de crecimiento de los nódulos de grafito ubicados en la *zona 2* se obtiene siguiendo el mismo razonamiento que para la *zona 3*, pero con las concentraciones correspondientes, obteniéndose la siguiente expresión

$$D \frac{(C^{l/g'} - C^{l/gr})}{R_{gr}} \mathbf{r}_l \mathbf{4p} R_{gr}^2 = \mathbf{4p} R_{gr}^2 \frac{dR_{gr}}{dt} (C_{gr} \mathbf{r}_{gr} - C^{l/gr} \mathbf{r}_l)$$

$$\frac{dR_{gr}}{dt} = \frac{D(C^{l/g'} - C^{l/gr}) \mathbf{r}_l}{R_{gr} (C_{gr} \mathbf{r}_{gr} - C^{l/gr} \mathbf{r}_l)} \quad (43)$$

Planteando balance de masa de soluto entre los estados anterior y posterior al crecimiento de los nódulos en la zona 2, integrando y despejando $C^{l/g''}$ se obtiene

$$\int_{R_n}^{R_g} C^{l/g'} [1 - U_{gr}^{z2}] \mathbf{4p} \mathbf{r}_g r^2 dr + \int_{R_n}^{R_g} C_{gr} U_{gr}^{z2} \mathbf{4p} \mathbf{r}_{gr} r^2 dr =$$

$$= \int_{R_n}^{R_g} C^{l/g''} [1 - U_{gr}^{z2}] \mathbf{4p} \mathbf{r}_g r^2 dr + \int_{R_n}^{R_g} C_{gr} U_{gr}^{z2} \mathbf{4p} \mathbf{r}_{gr} r^2 dr$$

$$C^{l/g''} = \frac{C^{l/g'} (1 - U_{gr}^{z2}) \mathbf{r}_g + C_{gr} (U_{gr}^{z2} - U_{gr}^{z2'}) \mathbf{r}_{gr}}{(1 - U_{gr}^{z2'}) \mathbf{r}_g} \quad (44)$$

En el presente modelo se considera que el crecimiento del grafito se da sólo cuando los nódulos están en contacto con el líquido. Se supone que cuando los nódulos se encuentran dentro de la zona 1 están totalmente rodeados por austenita y dejan de crecer.

El crecimiento promedio de cada grupo de nódulos resulta

$$\Delta R_{grj}^{pro} = \frac{N_{grj}^{z3}}{N_{grj}} \Delta R_{grj}^{z3} + \frac{N_{grj}^{z2}}{N_{grj}} \Delta R_{grj}^{z2} + \frac{N_{grj}^{z1}}{N_{grj}} 0 \quad (45)$$

3.9 Cálculo de $C_{\forall g}$ a partir de una distribución uniforme

Conocidos d , $C_{l/g'}$, $C_{pro''}$ y R_g' , y haciendo un planteo de equilibrio de masa de soluto, se obtiene $C_{\forall g}$

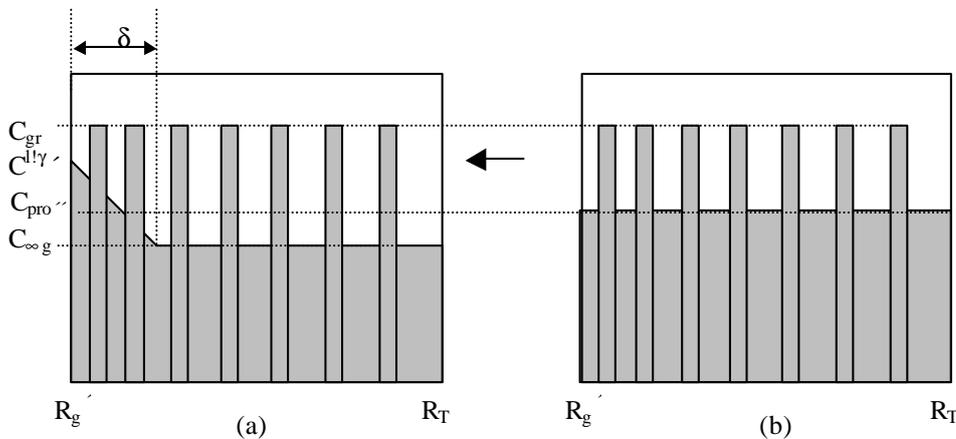


Figura 9

Teniendo en cuenta que la expresión de $C(r)$ en función del radio en la zona comprendida por R_g' y $R_g' + d$ (Ver Figura 9.a) es

$$C_{(r)} = C^{l/g} - \frac{(C^{l/g} - C_{\infty g})(r - R_g')}{d} \quad (46)$$

y planteando balance de masa de soluto, resolviendo las integrales y despejando la incógnita $C_{\infty g}$

$$\begin{aligned} & \int_{R_g'}^{R_g'+d} C_{(r)} [1 - U_{gr}^{z3}] 4p r_g r^2 dr + \int_{R_g'+d}^{R_T} C_{\infty g} [1 - U_{gr}^{z3}] r_g 4p r^2 dr = \\ & = \int_{R_g'}^{R_T} C_{pro} [1 - U_{gr}^{z3}] 4p r_g r^2 dr \\ C_{\infty g} & = \frac{C^{l/g} d (6 R_g'^2 + 4 R_g' d + d^2) + C_{pro} (-R_T^3 + R_g'^3)}{4 R_g'^3 + 6 R_g'^2 d + 4 R_g' d^2 + d^3 - 4 R_T^3} \end{aligned} \quad (47)$$

4 CONCLUSIONES

En este trabajo se presenta un nuevo modelo numérico microestructural para la simulación de la solidificación equiaxial de una fundición nodular eutéctica que, debido a su enfoque fenomenológico, puede ser fácilmente acoplado a la resolución, a nivel macromecánico, de la ecuación de conducción del calor por elementos finitos. Dicho modelo responde a la teoría plurinodular de solidificación y tiene en cuenta la nucleación independiente de la austenita y el grafito. El aporte fundamental reside en la combinación del crecimiento dendrítico de la austenita y esférico de los nódulos de grafito en el mismo modelo, manteniendo en todo momento el balance de masa de soluto. La nucleación y el crecimiento independientes de la austenita permite conocer el tamaño de grano final de la misma, imposible de determinar en los modelos que utilizan la regla de la palanca. La importancia del tamaño final de los granos de austenita debe a la gran influencia que el mismo ejerce sobre las características de la microsegregación y de las transformaciones de fase posteriores y por lo tanto sobre las características mecánicas finales de la pieza.

Como trabajo futuro se propone comparar las respuestas que se obtengan con el presente modelo con las de otros modelos que no simulan el crecimiento dendrítico de la austenita.

5 REFERENCIAS

- [1] C. Van de Velde, "A New Approach to the Solidification of Cast Iron", <http://members.tripod.lycos.nl/cvdv>
- [2] K. Su, I. Ohnaka, I. Yamauchi y T. Fukusako, "Computer Simulation of Solidification of Nodular Cast Iron", Proceedings of the *Third International Symposium on the Metallurgy of Cast Iron*. Estocolmo, agosto 29-31, pp. 181-189 (1984).

- [3] E. Fras, "A Computer-aided Simulation of the Kinetics of Solidification of the Eutectic Ductile Cast Iron", Proceedings of the *Third International Symposium on the Metallurgy of Cast Iron*. Estocolmo, agosto 29-31, pp. 191-199 (1984).
- [4] H. Fredriksson, I. Svensson, "Computer Simulation of the Structure Formed During Solidification of Cast Iron", Proceedings of the *Third International Symposium on the Metallurgy of Cast Iron*. Estocolmo, agosto 29-31, pp. 273-284 (1984).
- [5] M. Castro, P. Alexandre, J. Lacaze, G. Lesoult, "Microstructures and Solidification Kinetics of Cast Irons: Experimental Study and Theoretical Modelling of Equiaxed Solidification of S. G. and Grey Cast Iron", Proceedings of the *Fourth International Symposium on the Metallurgy of Cast Iron*, Tokio, septiembre 4-6, pp. 433-440 (1989).
- [6] M. I. Onsoien, O. Grong, O. Gundersen, T. Skaland, "A process Model for the Microstructure Evolution in Ductile Cast Iron: Part I. The Model", *Metallurgical and Material Transaction A*, vol. 30 A, pp. 1053-1068 (1999).
- [7] M. I. Onsoien, O. Grong, O. Gundersen, T. Skaland, "A process Model for the Microstructure Evolution in Ductile Cast Iron: Part II. Applications of the Model", *Metallurgical and Material Transaction A*, vol. 30 A, pp. 1069-1079 (1999).
- [8] B. C. Liu, H. D. Zhao, W. Y. Liu, D. T. Wang, "Study of Microstructure Simulation of Spheroidal Graphite Cast Iron", *Int. J. Cast Metals Res.*, vol. 11 (5), pp. 471-476 (1999).
- [9] H. Zhao, B. Liu, "Modeling of Stable and Metastable Eutectic Transformation of Spheroidal Graphite Iron Casting", *ISI J. International*, vol. 41 (9), pp. 986-991 (2001).
- [10] A. Rickert, y S. Engler, "Solidification Morphology of Cast Irons", Proceedings of the *Third International Symposium on the Physical Metallurgy of Cast Iron*, Estocolmo, agosto 29-31, pp. 165-174 (1984).
- [11] R. Hummer, "A Study of the Shrinkage and Dilatation During Solidification of Nodular Cast Iron – Its Relation to the Morphology of Crystallisation", Proceedings of the *Third International Symposium on the Metallurgy of Cast Iron*, Estocolmo, agosto 29-31, pp. 213-222 (1984).
- [12] D. M. Stefanescu, D. K. Bandyopadhyay, "On the Solidification Kinetics of Spheroidal Graphite Cast Iron", Proceedings of the *Fourth International Symposium on the Physical Metallurgy of Cast Iron*, Tokio, septiembre 4-6, pp. 15-26 (1989).
- [13] R. Boeri, *The Solidification of Ductile Cast Iron*, Tesis Doctoral, University of British Columbia, Canadá (1989).
- [14] J. Sikora, G. Rivera y H. Biloni, "Metallographic Study of the Eutectic Solidification of Gray, Vermicular and Nodular Cast Iron", Proceedings of F. Weimberg *International Symposium on Solidification Processing*, Pergamon Press, pp. 280-288 (1990).
- [15] G. Rivera, R. Boeri, y J. Sikora, "Revealing the Solidification Structure of Nodular Iron", *Cast Metals*, vol. 8 (1), pp. 1-5 (1995).

- [16] G. Rivera, R. Boeri, y J. Sikora, "Counting Eutectic Grains in SG Cast Iron", *Advanced Materials Research*, vol. 4, pp. 169-174 (1997).
- [17] G. Rivera, R. Boeri, y J. Sikora, "Influence of the Solidification Microstructure on the Mechanical Properties of Ductile Iron", *Int. J. Cast Metals Res.*, vol. 11 (5), pp. 267-272 (1999).
- [18] G. Rivera, "Estructura de Solidificación de Fundiciones de Hierro con Grafito Esferoidal", *Tesis Doctoral*, Universidad Nacional de Mar del Plata, Mar del Plata (2000).
- [19] P. Dardati, D. Celentano, L. A. Godoy, R. Boeri, "Simulación Numérica del Proceso de Solidificación de la Fundición Dúctil", *Mecánica Computacional*, Vol. XXI, pp. 2855-2874 (2002).
- [20] P. Dardati, D. Celentano, L. A. Godoy, R. Boeri, "Numerical Simulation of Solidification Processes of Spheroidal-Graphite Cast Iron", *Journal of Computational Methods in Sciences and Engineering*, en prensa.
- [21] D. Celentano, "Un Modelo Termomecánico para Problemas de Solidificación de Metales", *Tesis Doctoral*, Universidad Politécnica de Catalunya, Barcelona (1994).
- [22] M. Rappaz y PH. Thévoz, "Solute Diffusion Model for Equiaxed Dendritic Growth", *Acta Metall.*, vol. 35, N° 7, pp.1487-1497 (1987).
- [23] M. Rappaz y PH. Thévoz, "Solute Diffusion Model for Equiaxed Dendritic Growth:Analytical Solution", *Acta Metall.*, vol. 35, N° 12, pp.2929-2933 (1987).
- [24] L. Nastac y D. Stefanescu, "Simulation of Microstructure Evolution During Solidification of Inconel 718", *AFS Transactions*, vol. 104, pp.96-193 (1996).
- [25] W. Kurz y D. Fisher, "Fundamentals of Solidification", Trans Tech Publications (1989).

GLOSARIO

A	Parámetro de nucleación de la austenita
b, c	Parámetros de nucleación del grafito
C_E	Concentración de carbono de la composición eutéctica
C_{TE}	Máxima solubilidad del carbono a temperatura eutéctica
C_0	Concentración de carbono inicial
$C^{l/g}$	Concentración de carbono del líquido en contacto con la austenita
$C^{g/l}$	Concentración de carbono de la austenita en contacto con el líquido
$C^{l/gr}$	Concentración de carbono del líquido en contacto con el grafito
$C^{g/gr}$	Concentración de carbono de la austenita en contacto con el grafito
C_{gr}	Concentración de carbono del grafito

$C_{\infty g}$	Concentración de carbono en el líquido alejado de la austenita
C_{pro}	Concentración promedio de carbono en el líquido intergranular
D	Coefficiente de difusión del carbono en el líquido
$f_{gr}^{z1}, f_{gr}^{z2}, f_{gr}^{z3}$	Fracción de volumen de grafito de zona 1, 2 y 3, respectivamente, con respecto al volumen total del grano
f^{z1}, f^{z2}, f^{z3}	Fracción de volumen de zona 1, 2 y 3, respectivamente, con respecto al volumen total del grano
f_l^{z2}, f_l^{z3}	Fracción de volumen de líquido de zona 2 y 3, respectivamente, con respecto al volumen total del grano
f_g	Fracción de volumen de austenita con respecto al volumen total del grano
f_s	Fracción de volumen de sólido con respecto al volumen total del grano
k	Coefficiente de partición del carbono
L	Calor latente de solidificación
m	Pendiente de la línea de líquidus
N_g	Densidad de grano de austenita
N_{gr}	Número de nódulos de grafito por unidad de volumen total de grano
$N_{gr}^{z1}, N_{gr}^{z2}, N_{gr}^{z3}$	Número de nódulos de grafito de zonas 1, 2 y 3, respectivamente, por unidad de volumen total de grano
$N_{gr}^{o z1}, N_{gr}^{o z2}, N_{gr}^{o z3}$	Numero de nódulos de grafito de zonas 1, 2 y 3 respectivamente
r	Radio
R_g	Radio de la esfera que envuelve las puntas de las dendritas
R_{gr}	Radio de nódulo de grafito
R_n	Radio de zona 1
R_T	Radio final del grano
t	Tiempo
T	Temperatura
T_{AL}	Temperatura de líquidus de la austenita
T_{AS}	Temperatura de sólidos de la austenita
T_E	Temperatura eutéctica
T_{GL}	Temperatura de líquidus del grafito
$U_{gr}^{z1}, U_{gr}^{z2}, U_{gr}^{z3}$	Volumen de grafito de las zonas 1, 2 y 3 por unidad de volumen de zona 1, 2 y 3 respectivamente
V_T	Volumen total de grano
∂	Espesor capa límite
ΔT	Sobreenfriamiento
Δt	Paso de tiempo
Γ	Coefficiente de Gibbs-Thomson
r_l, r_g, r_{gr}	Peso específico del líquido, la austenita y el grafito respectivamente