Asociación Argentina



de Mecánica Computacional

Mecánica Computacional Vol XXXI, págs. 1909-1936 (artículo completo) Alberto Cardona, Paul H. Kohan, Ricardo D. Quinteros, Mario A. Storti (Eds.) Salta, Argentina, 13-16 Noviembre 2012

MODELADO DE LAS TRANSFORMACIONES DIFUSIONALES DE LA AUSTENITA DURANTE EL ENFRIAMIENTO CONTINUO DE UNA FUNDICIÓN NODULAR

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

^bInstituto de Mecánica Aplicada, Facultad de Ingeniería, Universidad Nacional de San Juan, Av. Libertador Gral. San Martín 1290 (O), San Juan, Argentina, fcarazo@unsj.edu.ar, http://www.ima.unsj.edu.ar

^bDpto. Ingeniería Mecánica y CIII, Universidad Tecnológica Nacional, FRC, Maestro M. López esq. Av. Cruz Roja Argentina s/n, Ciudad Universitaria, Córdoba, Argentina, pdardati@industrial.frc.utn.edu.ar, http://www.frc.utn.edu.ar

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

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

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

Resumen. En este trabajo se presenta un modelo de las transformaciones difusionales de la austenita durante el enfriamiento continuo de una fundición nodular el cual contempla: el crecimiento de los nódulos de grafito desde el final de la solidificación hasta el límite superior del intercrítico eutectoide estable; la nucleación de los granos de ferrita; el crecimiento de los granos de ferrita y de los nódulos de grafito, diferenciando el que ocurre durante el intercrítico eutectoide estable del que tiene lugar por debajo del límite inferior del intervalo mencionado; la nucleación de las colonias de perlita y su crecimiento considerando una ley de difusión mixta del carbono. A nivel micro-estructural las condiciones iniciales para las transformaciones de fase en estado sólido se obtienen a partir de un modelo de la solidificación basado en la teoría plurinodular. La temperatura se calcula a partir de un modelo macro-estructural resuelto en el contexto del método de los elementos finitos. Los principales resultados calculados al variar algunos de los parámetros fundamentales del modelo en un elemento finito de dos nodos son presentados y discutidos. Finalmente, se elaboran la conclusiones que se desprenden de este trabajo.

1. INTRODUCCIÓN

Los progresos realizados en los últimos años en el modelado computacional del enfriamiento de la fundición nodular, tienen su sustento 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 nivel macro-estructural, 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 planteados a nivel micro-estructural permiten determinar variables propias de esta escala, imposibles de obtener con modelos planteados únicamente a nivel macro-estructural, 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 muestra 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 ocupado por el micro-constituyente llamado perlita. La importancia de llevar a cabo el estudio completo del enfriamiento de la fundición nodular (solidificación y transformaciones de fase en estado sólido) se debe a que aún cuando las características de su microestructura se definen durante las transformaciones que ocurren en estado sólido, el desarrollo de los cambios de fase en estado sólido: crecimiento de los nódulos de grafito desde el final de la solidificación hasta el comienzo de la transformación eutectoide estable, y las transformaciones eutectoide estable y metaestable dependen de las características microestructurales obtenidas al final de la solidificación de la austenita según el sistema estable Fe-C-Si, mientras que granos de austenita pequeños y micro-segregaciones de elementos aleantes, tales como el cobre, el manganeso o el estaño, favorecen la transformación de la austenita según el sistema metaestable Fe-C-Si.

Según nuestro conocimiento, la mayoría de los artículos que tratan el modelado de las transformaciones de fase de la fundición nodular, están dedicados al estudio de la solidificación y de los tratamientos térmicos, siendo menor la cantidad de artículos que abordan el modelado de las transformaciones de fase en estado sólido, y menos aún el 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 (eutéctico no divorciado). En tanto la teoría plurinodular plantea que ambas fases, el grafito y la austenita, durante su crecimiento dendrítico, alcanza y envuelve a los nódulos de grafito formando el característico grano eutéctico. La mayoría de los artículos 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., 1991; Ohnaka, 1999; Wessén y Svensson, 1996). No obstante esto y concientes de que los modelos numéricos de la solidificación de la fundición nodular deben incluir la nucleación independiente de la austenita y del 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 eutéctica 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 artículo 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).

Entre los principales artículos 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 instantáneo que tiene lugar 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 micro-estructurales tales como fracciones de fase, espaciado interlaminar 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 artículo en el cual se lleva a cabo un modelado computacional 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 macro-estructural, la cual sólo permite conocer la fracción de perlita transformada pero no sus características micro-estructurales. Wessén y Svensson (1996) simulan el crecimiento de los nódulos de grafito desde el final de la solidificación hasta el comienzo de la transformación etutectoide estable, y la transformación eutectoide estable en una fundición nodular de composición eutéctica. Al crecimiento de los nódulos hasta el inicio del cambio de fase eutectoide estable, lo modelan en base a consideraciones termodinámicas. A la transformación eutectoide estable la dividen en tres etapas: i) para la nucleación de la ferrita proponen que la misma nuclea a una temperatura 20°C por debajo del valor de la temperatura eutectoide estable, para luego envolver 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; *ii*) al crecimiento de los granos de ferrita lo consideran controlado por una reacción interfacial desarrollada en la interfase grafito/ferrita cuya velocidad es inversamente proporcional al radio del nódulo de grafito; iii) finalmente 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 una ley empírica (Noguchi y Nagaoka, 1985), 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, finalizando en el instante en el que el valor de la densidad de las colonias de perlita alcanza el valor correspondiente a la densidad de los 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. (1991) 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 tiene lugar para un valor de la temperatura determinado experimentalmente. Al crecimiento de los nódulos de grafito lo calculan aproximando el equilibrio del carbono en la interfase grafito/ferrita.

En este artículo 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 presentados corresponden a un estudio paramétrico llevado a cabo con un elementos finito de dos nodos a partir de cuyo análisis se plantearon las conclusiones que se desprenden de este artículo. La forma en la que se ha estructurado este artículo es la siguiente: en la Sección 2 se mencionan las principales características de la transformación difusional de la austenita contempladas en este artículo. En la Sección 3 se desarrollan los principales aspectos del modelo propuesto. En la Sección 4 se presenta y desarrolla brevemente los principales aspectos del modelo de los cambios de fase contemplados en este artículo. En la Sección 5 se presentan los resultados del caso basa empleado en el estudio paramétrico y se analizan los resultados numéricos obtenidos al variar la velocidad de enfriamiento y el contenido inicial de silicio. Por último en la Sección 6 se elaboran las conclusiones que se desprenden de este artículo.

2. TRANSFORMACIÓN DIFUSIONAL DE LA AUSTENITA

Al finalizar la solidificación de una fundición nodular, su microestructura está formada por los nódulos de grafito embebidos en una matriz metálica de austenita con diferentes tipos de defectos: micro-poros, micro-rechupes, defectos puntuales, lineales, superficiales y volumétricos; además de las inhomogeneidades propias de las micro-segregaciones que ocurren durante la solidificación. De los factores mencionados, unos de los que mayor influencia ejerce sobre las transformaciones de fase en estado sólido, son las micro-segregaciones.

La importancia de conocer como segregan los elementos a nivel micro-estructural, se debe a la necesidad de establecer su distribución en la austenita de manera tal de tener en cuenta su influencia en la termodinámica y en la cinética de las transformaciones de fase posteriores a la soldificación.



Figura 1: Microestructura típica de una fundición nodular semiperlítica.

De los elementos comunmente presentes en las fundiciones nodulares, el níquel, el cobre y el silicio segregan de forma negativa, concentrándose en las primeras zonas en solidificar (PZS de aquí en más). A su vez, de los elementos mencionados, el silicio se caracteriza por promover las transformaciones de fase según un sistema estable Fe-C-Si, aumentando la cantidad de grafito y ferrita a través de la disociación del carburo de hierro en grafito y austenita, además de incrementar las temperaturas de transformación eutectoide estable y metaestable y el intervalo entre ambos valores. En tanto el níquel y el cobre se caracterizan por promover el efecto opuesto, tanto en lo referido a los valores de las temperaturas de transformación de la austenita como en el tipo de matriz que promueven. Por otro lado, elementos como el molibdeno, el cromo y el manganeso segregan de forma positiva, concentrándose en las últimas zonas en solidificar (UZS de aquí en más) (Figura 2) y promoviendo las transformaciones de fase según el sistema metaestable Fe-C-Si además de formar carburos al combinarse con el hierro.

A partir de lo mencionado en el párrafo precedente, y teniendo en cuenta que los valores de las temperaturas críticas en un sistema Fe-C-X dependen de los porcentajes en peso de los elementos presentes, existirá una diferencia entre los valores de las temperaturas de los puntos eutectoide estable y metaestable que se dan entre, por ejemplo: los nódulos de grafito, sobre cuya periferia se concentran, entre otros elementos, el níquel, el cobre y el silicio; y la periferia de las células eutécticas (las cuales delimitan las UZS como se esquematiza en la Figura 2) sobre las que micro-segregan, entre otros elementos, el molibdeno, el cromo y el manganeso. Teniendo en cuenta que el valor de la temperatura eutectoide estable aumenta con el contenido de silicio, los granos de ferrita precipitarán en la austenita sobre el contorno de los nódulos de grafito, creciendo por la difusión del carbono desde la austenita hacia los nódulos por un lado, y hacia la austenita alejada de la interfase austenita/grafito por el otro. Una vez que la temperatura de la aleación alcanza el valor correspondiente al punto eutectoide metaestable (punto S en la Figura 8); y si la austenita no ha transformado totalmente en grafito y ferrita, la perlita puede nuclear y crecer en competencia con la ferrita y el grafito. La nucleación de las colonias de perlita ocurrirá en la superficie de las células eutécticas debido a que sus contornos delimitan las UZS y estas son las zonas sobre las que precipitan los elementos que segregan positivamente y que forman una barrera para la difusión del Carbono (Rivera, 2000).¹ Una vez que las colonias

¹No obstante algunos investigadores han reportado que la perlita nuclea sobre los granos de ferrita, no existe evidencia experimental que de soporte a esta idea.

de perlita nuclearon, el crecimiento de este micro-constituyente será función de la difusión de corto alcance del Carbono que se da entre las láminas de ferrita y las del carburo de hierro.

Finalmente, cuando la austenita ha transformado totalmente y teniendo en cuenta que la perlita es un micro-constituyente metaestable, durante el resto del enfriamiento puede descomponerse en las fases estables ferrita y grafito; no obstante esto y debido a que las velocidades de enfriamiento registradas en las piezas industriales comumenmente producidas con estas aleaciones ternarias Fe-C-Si son relativamente bajas, esta transformación no tiene lugar, y la cantidad final de ferrita observada en una pieza a temperatura ambiente, en la mayoría de los casos corresponde a la desarrollada durante la transformación eutectoide estable.



Figura 2: Diagrama esquemático de las transformaciones de la austenita a grafito, a ferrita y a perlita propuesto en este artículo.

3. PRINCIPALES ASPECTOS DEL MODELO

Los principales aspectos del modelo desarrollado en este artículo se muestran en la Figura 2 y corresponden a: la contemplación del crecimiento de los nódulos de grafito desde el final de la solidificación hasta el comienzo de la transformación eutectoide estable, de las transformaciones eutectoides estable y metaestable y de su acoplamiento al modelo de las transformaciones de fase durante la solidificación desarrollado por Dardati (2005). Los principales resultados del modelo micro-estructural de la solidificación tenidos en cuenta en las transformaciones en estado sólido son:

- 1. Las fracciones volumétricas de grafito y austenita.
- 2. El porcentaje en peso de carbono en la austenita.
- 3. Los tamaños y la distribución de tamaños de los nódulos de grafito.

- 4. El tamaño del grano de austenita (EVR).
- 5. El tamaño de las células eutécticas.
- 6. Los porcentajes en peso de los elementos micro-segregados en las UZS.

A su vez, los valores de las seis cantidades mencionadas son tomados como condiciones iniciales en el modelo de las transformaciones de fase propuesto en este artículo, algo no registrado en los trabajos mencionados en la revisión bibliográfica llevada a cabo en la Sección 1.

Tal como se mencionó al inicio de esta sección, las principales características del modelo de las transformaciones de fase desarrollado son:

- 1. El crecimiento de los nódulos de grafito desde el final de la solidificación y hasta el comienzo de la transformación eutectoide estable. Siempre que el contenido en carbono en la austenita (C_{γ_C}), sea mayor a la concentración de equilibrio de carbono en la austenita en la interfase con el grafito ($C_C^{\gamma/gr}$).
- 2. La nucleación de los granos de ferrita se modela como un fenómeno que ocurre instantáneamente sobre los nódulos de grafito, cuando la temperatura de la aleación alcanza el valor correspondiente al límite superior del intercrítico eutectoide estable $(T_{a_T}^{\alpha})^2$
- 3. El crecimiento de los nódulos de grafito y de los granos de ferrita se divide en dos etapas:
 - Durante el intercrítico eutectoide estable, el crecimiento de los nódulos de grafito tiene el mismo origen que el mencionado en el punto uno, con la salvedad de diferenciarse el carbono que difunde a través de la austenita del que lo hace a través de la ferrita. Por otro lado, el crecimiento de los granos de ferrita se deberá a la difusión del carbono hacia la austenita alejada de la interfase austenita/grafito si el contenido en carbono en la austenita es mayor que el valor de la concentración de equilibrio de dicho elemento en la austenita en la interfase con el grafito.
 - A temperaturas menores al límite inferior del intercrítico eutectoide estable (T^α_{A1}), el crecimiento de los nódulos de grafito se deberá al carbono que difunde a través de la austenita (siempre que los nódulos de grafito no hayan sido envueltos totalmente por la ferrita), y a través de los granos de la ferrita. Por otro lado, el crecimiento de los granos de ferrita se deberá al empobrecimiento en carbono de la austenita debido al carbono que difunde hacia los nódulos de grafito y hacia la austenita alejada del grafito.
- 4. La nucleación de las colonias de perlita se modela como un proceso continuo a partir de que la temperatura alcanza el valor del límite superior del intercrítico eutectoide metaestable $(T_{a_T}^P)$.
- 5. El crecimiento de las colonias de perlita se modela considerando la difusión del carbono a través del volumen de la austenita, y del borde del grano correspondiente al frente de la colonia de perlita en contacto con la austenita.

²El intercrítico eutectoide estable corresponde al intervalo delimitado por las temperaturas de inicio de la transformación de la austenita a ferrita (enfriamiento, $T^{\alpha}_{a_T}$), y de comienzo de la transformación de la ferrita a austenita (calentamiento, $T^{\alpha}_{A_a}$).

4. MODELOS DE LAS TRANSFORMACIONES METALÚRGICAS

En esta sección se presentan las principales hipótesis y las expresiones a partir de las cuales se modelan las transformaciones de fase tenidas en cuenta:

- El crecimiento de los nódulos de grafito desde el final de la solidificación hasta el comienzo de la transformación eutectoide estable.
- La transformación eutectoide estable.
- La transformación eutectoide metaestable.

Un desarrollo detallado de las expresiones planteadas en las siguientes sub-secciones puede verse en Carazo (2012).

4.1. Crecimiento de los nódulos de grafito desde el final de la solidificación hasta el comienzo de la transformación eutectoide estable

En esta sub-sección se presenta la expresión a partir de la cual se calcula la velocidad de variación de los radios de los nódulos de grafito desde el final de la solidificación hasta el comienzo de la transformación eutectoide estable. Esta transformación, tal como se mencionó en la Sección 1, no ha sido tenida en cuenta por la mayoría de los investigadores, y aún cuando la han considerado, la densidad y el tamaño de los nódulos de grafito al final de la solidificación no ha sido obtenida a partir de un modelo micro-estructural de la solidificación el cual contemple la conservación de carbono a escala micro-estructural, ni muchos menos a partir de un modelo micro-estructural de la solidificación basado en la teoría plurinodular, aún cuando estos dos factores resultan determinantes para el cambio de fase contemplado en esta sección, y éste de fundamental importancia para las transformaciones de fase posteriores. Un claro ejemplo de lo mencionado en la oración precedente, se da cuando la velocidad de enfriamiento es elevada, lo cual provoca que el equilibrio en la interfase grafito/austenita pueda no alcanzarse y que el carbono difunda hacia las zonas alejadas de los nódulos de grafito, promoviendo la formación de carburos y de perlita en lugar del eutectoide estable formado por el grafito y la ferrita; en tanto que bajas velocidades de enfriamientos, proveerán los tiempos necesarios para que el carbono difunda durante esta etapa de las transformaciones y posteriormente en la eutectoide estable, con lo cual se logran matrices ferríticas características por poseer granos de ferrita y nódulos de grafito de gran tamaño (Wessén y Svensson, 1996).

En la Figura 3(a) se muestra un corte de un diagrama estable Fe-C-Si para una composición fija de silicio sobre el cual se indica, para una temperatura T^* cuyo valor es menor al de la temperatura eutéctica ($T_{E'}$ de aquí en más) y mayor a $T_{a_T}^{\alpha}$, el valor de $C_C^{\gamma/gr}$. Por otro lado, en la Figura 3(b) se esquematizan el perfil de concentración de carbono para el intervalo de temperaturas mencionado junto a un nódulo de grafito rodeado de austenita.

Partiendo de la consideración de que en la interfase austenita/grafito existe equilibrio, durante el enfriamiento, y para cada valor de la temperatura comprendido entre los de $T_{E'}$ y $T_{a_T}^{\alpha}$, los valores de $C_C^{\gamma/gr}$ estarán dados por la línea de máxima solubilidad del carbono en la austenita, delimitada por los puntos E' y S' en la Figura 3(a). Por otro lado, en el modelo del crecimiento de los nódulos de grafito planteado en esta sección, la distribución del carbono en la austenita se asume uniforme, y su valor inicial, correspondiente al calculado al final de la solidificación a partir del planteo del balance de masa de carbono en el EVR, es recalculado cada vez que la fracción volumétrica de grafito cambia.



(a) Esquema de una parte de un diagrama estable Fe-C-Si con las com-(b) a) – Perfil de concentración del posiciones de interés para una temperatura $T^{\alpha}_{a_T} < T^* < T_{E'}$. carbono. b) – Un cuarto de un nódulo de grafito rodeado por austenita.

A partir de las consideraciones mencionadas, la tasa de variación del radio de los nódulos de grafito será

$$\dot{R}_{gr} = \frac{D_C^{\gamma}}{R_{gr}} \left(\frac{C_{\gamma_C} - C_C^{\gamma/gr}}{\rho_{gr}/\rho_{\gamma}C_{gr} - C_C^{\gamma/gr}} \right) \tag{1}$$

donde R_{gr} es el radio de los nódulos de grafito, ρ_{gr} y ρ_{γ} son las densidades del grafito y de la austenita respectivamente, C_{gr} es la concentración de carbono en el grafito, finalmente D_C^{γ} es el coeficiente de difusión del carbono en la austenita. El punto sobre R_{gr} simboliza su derivada temporal.

4.2. Transformación eutectoide estable

La transformación eutectoide estable se modela como un proceso que ocurre en dos etapas, las cuales son:

- 1. Nucleación de los granos de ferrita.
- 2. Crecimiento de los nódulos de grafito y de los granos de ferrita; a su vez, a esta etapa se la divide en dos sub-etapas, a saber:
 - a) La que tiene lugar durante el intercrítico eutectoide estable (Figura 4(a)).
 - *b*) La que se desarrolla a temperaturas menores al límite inferior del intercrítico eutectoide estable (Figura 6(a)).

En las siguientes sub-secciones se desarrollan y explican cada una de las etapas y sub-etapas mencionadas.



Figura 3: a) – Nucleación de los granos de ferrita ($A_{\alpha/gr} \approx 0$). b) – Crecimiento de los granos de ferrita cuando $A_{\alpha/gr} \leq A_{\gamma/gr}$. c) – Crecimiento de los granos ferrita cuando $A_{\alpha/gr} \geq A_{\gamma/gr}$. d) – Crecimiento de los granos de ferrita cuando $A_{\alpha/gr} \geq A_{\gamma/gr}$. d) – Crecimiento de los granos de ferrita cuando $A_{\gamma/gr} = 0$ y $A_{\alpha/gr} = 1$.

4.2.1. Nucleación de los granos de ferrita

De los pocos trabajos que modelan el cambio de fase eutectoide estable durante el enfriamiento continuo de una fundición nodular, solo Wessén y Svensson (1996) incorporan la nucleación de los granos de ferrita, considerando que sobre cada nódulo de grafito nuclea un número fijo de granos de ferrita cuando la temperatura alcanza el valor correspondiente a la temperatura eutectoide estable. Siguiendo la idea propuesta por estos autores, en el modelo eutectoide estable planteado en este artículo, la nucleación de los granos de ferrita se modela como un fenómeno instantáneo para lo cual se considera que un número fijo de granos de ferrita nuclea sobre cada nódulo de grafito cuando la temperatura de la aleación alcanza el valor correspondiente a $T^{\alpha}_{a_T}$ (Figura 3-a).

En la Figura 3, donde $A_{\alpha/gr}$ y $A_{\gamma/gr}$ son los porcentajes de la superficie de cada nódulo de grafito en contacto con la ferrita y la austenita respectivamente, se esquematiza el modelo de nucleación y crecimiento de los granos de ferrita propuesto en este artículo.

4.2.2. Crecimiento de los granos de ferrita y de los nódulos de grafito durante intercrítico eutectoide estable

Cuando el valor de la temperatura de la aleación se encuentra entre $T_{a_T}^{\alpha}$ y $T_{A_1}^{\alpha}$ tal como se muestra en la Figura 4(a), la difusión del carbono se deberá a:

- 1. La diferencia entre los valores de C_{γ_C} y $C_C^{\gamma/gr}$ (Figura 3(b)).
- 2. La diferencia entre los valores de C_{γ_C} y la concentración de equilibrio de carbono en la austenita en contacto con la ferrita $(C_C^{\gamma/\alpha})$ (Figura 3(b)-a).

A su vez, el crecimiento de los granos de ferrita nucleados sobre los nódulos de grafito, se deberá a la difusión del carbono hacia la austenita alejada de la interfase con la ferrita tal como se muestra en la Figura 4(b) y el valor de la velocidad de crecimiento del radio de los granos será

$$\dot{R}_{\alpha} = D_{C}^{\gamma} \frac{(C_{C}^{\gamma/\alpha} - C_{\gamma_{C}})}{(C_{C}^{\gamma/\alpha} - \rho_{\alpha}/\rho_{\gamma}C_{C}^{\alpha/\gamma})} \frac{(R_{\alpha} + \delta_{\gamma})}{R_{\alpha}\delta_{\gamma}}$$
(2)

donde R_{α} es el radio del grano de ferrita, ρ_{α} es la densidad de la ferrita y δ_{γ} es el espesor de la capa límite de carbono en la austenita delante de la ferrita. Este último valor se calcula a partir

de:

$$\delta_{\gamma} = \frac{2D_C^{\gamma}}{\dot{R}_{\alpha}} \tag{3}$$

El valor de δ_{γ} presente en la Expresión 2 corresponde al calculado en el paso anterior de su integración. Al igual que en la Expresión 1, el punto sobre R_{α} indica su derivada temporal.

Un aspecto a tener en cuenta en el modelo planteado en esta sub-sección, es que los granos de ferrita no crecen si el valor de C_{γ_C} es mayor que el correspondiente a $C_C^{\gamma/\alpha}$.



(a) Esquema de una parte de una sección de un (b) Gradiente de carbono que promueve diagrama Fe-C-Si para una contidad fija de silicio su difusión hacia la austenita alejada de la y una temperatura comprendida entre $T^{\alpha}_{a_T}$ y $T^{\alpha}_{A_1}$. ferrita durante el intercrítico eutectoide estable.

Figura 4: Corte de una diagrama ternario Fe-C-Si para un porcentaje fijo de silicio y perfil de concentración de carbono correspndiente para una temperatura comprendida en el intercrítico eutectoide estable.

Una vez que los granos de ferrita han nucleado y crecido, los nódulos de grafito son cubiertos en mayor o menor medida por los granos de ferrita según sea su tamaño (superficie), y teniendo en cuenta que para valores de la temperaturas mayores al límite inferior del intercrítico eutectoide estable, la concentración de equilibrio de carbono en la ferrita en contacto con la austenita es menor que la concentración de equilibrio de carbono en la ferrita en contacto con el grafito (lo cual se observa extrapolando la linea correspondiente a $C_C^{\alpha/gr}$ en la Figura 5 a temperaturas mayores al límite inferior del intercrítico eutectoide estable), para el cálculo de la velocidad de crecimiento de los nódulos de grafito solo se tendrá en cuenta la difusión del carbono a través de la austenita.

De esta manera y siguiendo el razonamiento propuesto en la Sub-sección 4.1, cuando la temperatura de la aleación se encuentra comprendida en el intercrítico eutectoide estable, la velocidad de crecimiento de los nódulos de grafito resulta

$$\dot{R}_{gr} = \frac{D_C^{\gamma}}{R_{gr}} \left(\frac{C_{\gamma_C} - C_C^{\gamma/gr}}{\rho_{gr} / \rho_{\gamma} C_{gr} - C_C^{\gamma/gr}} \right)$$
(4)

El valor de $C_C^{\gamma/gr}$ se obtiene extrapolando la línea de máxima solubilidad del carbono en la austenita para valores de la temperatura menores a $T_{a_T}^{\alpha}$ (tal como se muestra en la Figura 5). En tanto el perfil de carbono corresponde al mostrado en la Figura 3(b)-a.



Figura 5: Esquema de una parte de una sección de un diagrama Fe-C-Si para una contidad fija de silicio y una temperatura menor a $T^{\alpha}_{a_T}$.

4.2.3. Crecimiento de los granos de ferrita y de los nódulos de grafito a temperaturas inferiores al límite inferior del intercrítico eutectoide estable

Cuando el valor de la temperatura de la aleación sea menor a $T^{\alpha}_{A_1}$, las fuerzas impulsoras para la difusión del carbono pasan a ser:

- 1. La diferencia entre los valores de $C_C^{\gamma/\alpha}$ y C_{γ_C} (Figura 6(b)).
- 2. La diferencia entre los valores de $C_C^{\alpha/\gamma}$ y $C_C^{\alpha/gr}$ (Figura 6(b)).
- 3. La diferencia entre los valores de C_{γ_C} y $C_C^{\gamma/gr}$ (Figura 3(b)-a).





(a) Esquema de una parte de una sección de un diagrama Fe-C-Si para una contidad fija de silicio y una temperatura menor a $T^{\alpha}_{A_1}$.

(b) Gradientes de carbono que promueven los flujos del mismo elemento en función de los cuales los granos de ferrita crecen por debajo del límite inferior del intercrítico eutectoide estable

Figura 6: Corte de una diagrama ternario Fe-C-Si para un porcentaje fijo de silicio y perfil de concentración de carbono correspondiente para una temperatura menor al límite inferior del intercrítico eutectoide estable.

De esta manera, la velocidad de crecimiento de los granos de ferrita se calcula a partir de

$$\dot{R}_{\alpha} = D_{C}^{\alpha} \frac{\left(C_{C}^{\alpha/\gamma} - C_{C}^{\alpha/gr}\right)}{\left(C_{C}^{\gamma/\alpha} - C_{C}^{\alpha/\gamma}\right)} \frac{R_{\alpha} \left(R_{\alpha} - R_{gr}\right)}{R_{gr}} + D_{C}^{\gamma} \frac{\rho_{\gamma}}{\rho_{\alpha}} \frac{\left(C_{C}^{\gamma/\alpha} - C_{\gamma_{C}}\right)}{\left(C_{C}^{\gamma/\alpha} - C_{C}^{\alpha/\gamma}\right)} \frac{\left(R_{\alpha} + \delta_{\gamma}\right)}{\delta_{\gamma} R_{\alpha}} \tag{5}$$

donde D_C^{α} es el coeficiente de difusión del carbono en la ferrita y $C_C^{\alpha/gr}$ es la concentración de equilibrio de carbono en la ferrita en la interfase con el grafito respectivamente.

Por otro lado y tal como se aclaró, ϕ_C^3 será nulo si el valor de $C_{\gamma C}$ es mayor que el de $C_C^{\gamma/\alpha}$. En este caso y al igual que para el crecimiento de los nódulos de grafito durante el intercrítico eutectoide estable, pueden presentarse dos situaciones en función de si el nódulo de grafito ha sido envuelto total o parcialmente por los granos de ferrita. Si el nódulo de grafito ha sido totalmente envuelto por los granos de ferrita nucleados sobre su superficie (Figura 7), la velocidad de crecimiento de los nódulos de grafito resulta

$$\dot{R}_{gr} = D_C^{\alpha} \frac{\rho_{\gamma}}{\rho_{\alpha}} \frac{\left(C_C^{\alpha/\gamma} - C_C^{\alpha/gr}\right)}{\left(C_{gr} - C_C^{\alpha/gr}\right)} \frac{R_{\alpha}}{R_{gr} \left(R_{\alpha} - R_{gr}\right)}$$
(6)

En el caso de que el nódulo de grafito no haya sido envuelto completamente por los granos de ferrita nucleados sobre su superficie, el carbono que difunde hacia el nódulo, lo hará a través de la ferrita y de la austenita. En este caso, la velocidad de crecimiento de los radios de los nódulos de grafito resulta

$$\dot{R}_{gr} = \underbrace{\dot{R}_{gr}}_{\gamma} \begin{vmatrix} A_{\gamma/gr} + \dot{R}_{gr} \end{vmatrix}_{\alpha} A_{\alpha/gr} \underbrace{A_{\alpha/gr}}_{\Delta R_{gr}|\alpha}$$
(7)

Los valores del primer y del segundo término del segundo miembro de la Expresión 7 se obtienen a partir de las Expresiones 4 y 6 respectivamente, ponderándolos en función del porcentaje de la superficie del nódulo de grafito en contacto con la austenita y la ferrita respectivamente.



Figura 7: Gradiente de carbono que promueve el flujo del mismo elementos hacia los nódulos de grafito a través de los granos de ferrita a temperaturas menores al límite inferior del intercrítico eutectoide estable.



Figura 8: Esquema de una porción de un diagrama metaestable Fe-C.

4.3. Transformación eutectoide metaestable

No obstante los principios generales de la nucleación y el crecimiento de la perlita desarrollados para los aceros son aplicables a las fundiciones, la forma en que esta transformación se lleva a cabo en las fundiciones nodulares, es condicionada por las características de la microestructura al final de la solidificación (Figura 2), lo cual influye marcadamente en la nucleación y el crecimiento de la perlita en este tipo de aleaciones.

A partir de la revisión bibliográfica llevada a cabo en la Sección 1, se puso de manifiesto que en la mayoría de los trabajos la transformación eutectoide metaestable es modelada sin considerar la nucleación de las colonias de perlita, y su velocidad de crecimiento es calculada mediante expresiones simplificadas o leyes fenomenológicas del tipo *Johnson-Mehl-Avrami-Kolmogorov* (Stefanescu y Kanetkar, 1985; Chang et al., 1992; Almansour et al., 1996), extrapolando los conceptos asociados a esta transformación en los aceros a las fundiciones nodulares. Sin embargo, las principales características micro-estructurales al final solidificación tales como: tamaño del grano de austenita y de las células eutécticas, distribución de las microsegregaciones, y tamaño y distribución de tamaños de los nódulos de grafito, las cuales influyen notablemente en las transformaciones de fase en estado sólido, no han sido tenidas en cuenta en la transformación eutectoide metaestable en el caso de las fundiciones nodulares. Como así tampoco los posibles caminos para que el carbono difunda durante el crecimiento de las colonias de perlita.

En este artículo la transformación eutectoide metaestable se modela como un proceso que ocurre en dos etapas, a saber:

- 1. Nucleación de las colonias de perlita.
- 2. Crecimiento de las colonias de perlita.

A continuación se describen las dos etapas mencionadas.

4.3.1. Nucleación de las colonias de perlita

Este proceso no ha sido tenido en cuenta por la mayoría de los investigadores en las fundiciones, y aquellos que lo hacen, emplean modelos que no tienen en cuenta las características de la microestructura al final de la solidificación. Lacaze y Gerval (1998) consideran que la transformación eutectoide meteastable ocurre del mismo modo que en los aceros, asumiendo que la perlita nuclea en la totalidad del volumen de la austenita y finaliza en el instante en que la densidad de las colonias de perlita iguala a la densidad de los nódulos de grafito. Stefanescu y Kanetkar (1985) proponen una ley de nucleación sin especificar los sitios donde ocurre, ni el criterio en base al cual finaliza. Chang et al. (1992, 1991); Almansour et al. (1996); Venugopalan (1989) modelan la transformación eutectoide metaestable a partir de leyes planteadas a nivel macro-estructural que solo permiten conocer la evolución de su fracción volumétrica.

Basados en observaciones experimentales, algunos investigadores postulan que las colonias de perlita nuclean en las últimas UZS (Rivera, 2000), hacia donde micro-segregan el molibdeno, el cromo y el níquel (elementos formadores de carburos y con coeficientes de difusión del carbono muy bajos). Por otro lado, otros investigadores proponen que la perlita nuclea sobre los granos de ferrita (Roviglione y Hermida, 2004), no dando ni evidencia experimental ni teórica acerca de sus afirmaciones.

En este artículo y a partir de la evidencia experimental reportada por Rivera (2000), se propone que las colonias de perlita nuclean en las zonas de encuentro de los brazos secundarios de las dendritas de austenita las cuales delimitan las UZS donde se forma el contorno de las células eutécticas tal como se observa en la Figura 2. De esta manera, la superficie de nucleación se calcula en base al número y al diámetro de las células eutécticas obtenidos al final de la solidificación.

La ley de nucleación continua a partir de la cual se calcula la densidad de las colonias de perlita, se obtiene derivando con respecto al tiempo una ley de nucleación exponencial del tipo Oldfield (1966) de donde resulta

$$\dot{N}_{V}^{P} = n\mu_{P}(\Delta T_{P})^{(n-1)}(1 - f_{\gamma})\dot{T}$$
(8)

donde ΔT_P es el sobreenfriamiento con respecto a $T_{a_T}^P$ (Figura 8), $(1 - f_{\gamma})$ es un coeficiente cuyo valor varía de 1 a 0 y por medio del cual se tiene en cuenta la disminución de los sitios de nucleación a medida que la austenita transforma, n es un coeficiente cuyo valor generalmente se adopta igual a dos y μ_P es un coeficiente que depende de la composición química y del grado de refinamiento de las micro-segregaciones de la micro-estructura al final de la solidificación.

El criterio a partir del cual se considera el cese de la nucleación de las colonias de perlita corresponde al instante en el que la superficie ocupada por las colonias de perlita iguala la superficie correspondiente a las células eutécticas, o cuando ocurre recalescencia y la temperatura no es menor que la temperatura alcanzada antes de que comience la recalescencia (si la austenita no ha transformado totalmente).

4.3.2. Crecimiento de las colonias de perlita

Una colonia de perlita está formada por láminas de ferrita y de carburo de hierro alternadas como se muestra en la Figura 9. De las fases y de los micro-constituyentes característicos de las aleaciones ferrosas, la perlita es el micro-constituyente más estudiado a lo largo del tiempo. No obstante esto, en las fundiciones nodulares no está del todo claro el mecanismo de difusión que promueve su crecimiento.

En un principio, Brandt (1945); Scheil (1946); Zener (1946); Hillert (1957) consideraron que el crecimiento de la perlita era controlado por la difusión del carbono a través del volumen de la austenita (ϕ_C^V en la Figura 9). Sin embargo y a partir de las discrepancias observadas entre los resultados experimentales y los resultados numéricos calculados según la teoría de la



Figura 9: Esquema de una colonia de perlita.

difusión del carbono en el volumen de la austenita; Hillert (1969), basándose en los modelos teóricos desarrollados en el estudio de la precipitación discontinua de precipitados llevados a cabo por (Turnbull, 1955; Cahn, 1957), los cuales plantearon que la difusión del carbono tiene lugar a través de los bordes de los granos; desarrolló un modelo de crecimiento de la perlita en el cual la difusión del carbono ocurre en el borde de grano formado por las colonias de perlita y el grano de austenita. A partir de estos trabajos se propusieron otras teorías para el crecimiento de la perlita (Shapiro y Kirkaldy, 1968; Sundquist, 1968), a partir de los cuales se desarrollaron modelos mixtos para el crecimiento de la perlita basados en la difusión del carbono en el volumen de la austenita y en el borde de grano.

El primer modelo del crecimiento de la perlita basado en la teoría de difusión mixta fue propuesto por Hashiguchi y Kirkaldy (1984). Posteriormente Nakajima et al. (2006) estudiaron la influencia de la difusión del carbono a través de la ferrita sin considerar la difusión del carbono en el frente de transformación. Recientemente Pandit y Bhadeshia (2011) propusieron un modelo simplificado del crecimiento de las colonias de perlita según un mecanismo de difusión mixto basado en la difusión en el volumen de la austenita y en el borde de grano para un acero.

Las principales hipótesis del modelo del crecimiento de las colonias de perlita propuesto en este artículo son:

- Las interfases entre las láminas de ferrita y de carburo de hierro se suponen planas a excepción de las zonas próximas a las uniones de las tres fases.
- Para las tensiones superficiales se asume que: $\sigma^{\gamma/\alpha} \approx \sigma^{\alpha/\theta}$ y $\sigma^{\gamma/\theta} \approx \sigma^{\alpha/\theta}$
- En las interfases austenita/ferrita y austenita/carburo de hierro se asume equilibrio, lo cual implica la igualdad de los potenciales químicos del hierro y del carbono, esto es:
 μ^γ_{Fe} = μ^α_{Fe} y μ^γ_C = μ^α_C.
- El espaciado interlaminar puede calcularse en base a la teoría de máxima velocidad de crecimiento (Zener, 1946) o de máxima generación de entropía (Puls y Kirkaldy, 1972).

De esta manera y a partir de lo mencionado anteriormente, la velocidad de crecimiento de las colonias de perlita resulta

$$\dot{R}_P = \left(\frac{C_e^{\gamma/\alpha} - C_e^{\gamma/\theta}}{C_\theta - C_\alpha}\right) \left(2D_{C_V}^{\gamma} + \frac{12D_C^B\delta_P}{\lambda_P}\right) \frac{\lambda_P}{\lambda_\alpha\lambda_\theta} \left[1 - (\lambda_c/\lambda_P)\right] \tag{9}$$

donde R_P es el radio de una colonia de perlita, $C_e^{\gamma/\alpha}$ y $C_e^{\gamma/\theta}$ son las concentraciones de equilibrio de carbono correpondientes a la temperatura eutectoide metaestable en la austenita en contacto con la ferrita y con el carburo de hierro respectivamente, C_{θ} y C_{α} son las concentraciones de carbono en el carburo de hierro y en la ferrita respectivamente, $D_{C_V}^{\gamma}$ y D_C^B son los coeficientes de difusión del carbono en la austenita y en el borde de grano, δ_P es el espesor del borde grano; y λ_P , λ_c , λ_{α} y λ_{θ} son los espaciados correspondientes a una colonia de perlita, crítico, y los espesores de las láminas de ferrita y de carburo de hierro respectivamente (Figura 9). El punto sobre R_P representa su derivada temporal.

5. APLICACIÓN DEL MODELO: ESTUDIO PARAMÉTRICO

A los fines de facilitar la interpretación de los resultados del estudio paramétrico presentado en esta sección, el mismo es llevado a cabo con el elemento finito de dos nodos mostrado en la Figura 10. En el caso considerado no se tiene en cuenta el molde ni se contempla el intercambio de calor ente el molde y la pieza, ni tampoco la convección y la radiación entre la pieza y el molde con el ambiente. En su lugar, la velocidad de enfriamiento está dada por el flujo de calor que se extrae de uno de los nodos del elemento (flecha roja en la Figura 10). Las dimensiones del elemento finito se asumen lo suficientemente reducidas como para eliminar las diferencias de las velocidades de enfriamiento entre los nodos, de modo tal de que las curvas de un solo nodo sean representativas de ambos.



Figura 10: Elemento finito empleado en el estudio paramétrico.

En la Tabla 1 se indican los valores de los coeficientes y de las propiedades termo-físicas de la fundición utilizadas en la simulación. La temperatura inicial de la fundición se considera igual a 1180°C (Figura 10).

Las expresiones empleadas para el cálculo de las temperaturas de equilibrio y los coeficientes de partición de los elementos presentes en la aleación durante la solidificación; y los valores de las temperaturas de equilibrio correspondientes a los límites superior e inferior de los intercríticos eutectoide estable y metaestable, los valores de las concentraciones de equilibrio de carbono, y los valores de los coeficientes de difusión del carbono en la ferrita y en la austenita durante los cambios de fase en estado sólido corresponden a los publicados en Carazo (2012). La relación del espaciado entre las láminas de ferrita y cementita se considera igual a siete (Capdevilla et al., 2005a). El paso de tiempo empleado en las simulaciones es de 0.5 s y la composición química de la aleación simulada en el caso base se muestra en la Tabla 2.

5.1. Principales resultados del caso base

En la Figura 11 se muestran los principales resultados del caso base empleado en el estudio paramétrico. En la Figura 11(a) se grafican en forma conjunta la evolución de la temperatura y de las fracciones volumétricas líquida, de grafito, de austenita, de ferrita y de perlita. A los fines de poder observar con mayor claridad las mesetas correspondientes a la solidificación y a los cambios de fase en estado sólido, en la Figura 11(b) solamente se grafica la evolución de la temperatura. En la Figura 11(c) se muestra la evolución de la totalidad de las fracciones

Temperatura [°C]	Calor específico $[kJ/kgK]$
0	550
777	704
1130	747
1200	915
1300	915
Densidad $[kg/m^3]$: 7000

Conductividad $[J/sm^{\circ}C]$: 42

MODELO DE LAS TRANSFORMACIONES DE FASE DURANTE LA SOLIDIFICACIÓN					
Calor latente eutéctico $[kJ/kg]$: $L_{eutéctico} = 160$					
Coeficiente de difusión del carbono en el líquido y en la austenita $[m^2/s]$: $D_C^l = 5.0 \times 10^{-10}$,					
$D_C^{\gamma} = 9.0 \times 10^{-11}$					
Coeficientes de nucleación grafito: $b^M = 6.0 \times 10^{13} [n^{\circ}grano/m^{3} \circ Cs]$ y $c^M = 340 [^{\circ}C]$					
Radio inicial de los nódulos de grafito $[m]$: $R_{gr}^0 = 1 \times 10^{-6}$					
Parámetro de nucleación austenita $[n^{\circ}grs/m^{3}{}^{\circ}C]: A_{\gamma} = 1 \times 10^{7}$					
Coefficiente de Gibbs-Thompson $[Km]$: $\Gamma_{GT} = 2 \times 10^{-7}$					
Densidad del grafito y de la austenita $[kg/m^3]$: $\rho_{gr} = 2023, \ \rho_{\gamma} = 7000$					
MODELO DE LAS TRANSFORMACIONES DE FASE EN ESTADO SÓLIDO					
Espesor inicial de la capa límite delante del frente de transformación (Stefanescu, 2009)					
$[m]:\delta=5\times10^{-10}$					
Calor latente ferrita $[kJ/kg]$: $L_{\alpha} = 40$					
Cantidad inicial de granos de ferrita $[granos]$: $n_{\alpha} = 6$					
Radio inicial de los granos de ferrita $[m]$: $R^0_{\alpha} = 1 \times 10^{-7}$					
Calor latente perlita $[kJ/kg]$: $L_P = 90$					
Coeficiente de nucleación de las colonias de perlita $[n^{\circ}grs/m^{3} \circ C]$: $\mu_P = 1 \times 10^{11}$.					
Energía interfacial en la intecara ferrita/cementita (Capdevilla et al., 2005b)					
$[J/m^2]: \sigma^{\alpha/\theta} = 9.4 \times 10^{-1}$					
Cambio de entalpía debido a la descomposición eutectoide (Zener, 1946) $[J/m^3]$:					
$\Delta H_V^P = 4.19 \times 10^6$					
Temperatura eutectoide metaestable (Kapturkiewicz et al., 2005) [°C] : $T_{e_M} = 731,7$					

Tabla 1: Propiedades termofísicas de la fundición y valores de los coeficientes y parámetros empleados en los modelos metalúrgicos de los cambios de fase.

Elemento	С	Si	Mn	Р	S	Cr	Cu	Sn	Mg	CE
%	3.62	2.6	0.240	0.010	0.009	0.008	0.01	0.009	0.052	4.5567

Tabla 2: Composición química de la aleación emplada en el caso base (valores expresados en porcentajes en peso).

volumétricas de fase, en dicha figura se observa como el líquido transforma a grafito y austenita, y posteriormente esta última fase lo hace: primero a grafito, luego a grafito y a ferrita, y finalmente a perlita. A partir de la misma figura y teniendo en cuenta las transformaciones contempladas, la transformación difusional de la austenita puede estudiarse diviéndola en tres zonas: la primera comprendida entre el fin de la solidificación y $T^{\alpha}_{a_T}$, donde la pendiente de la curva de transformación es pequeña; la segunda desde $T^{\alpha}_{a_T}$ hasta $T^P_{a_T}$, cuya pendiente es mayor que la correspondiente a la primer etapa; y la tercera, desde $T^P_{a_T}$ hasta el fin de la transformación de la austenita, cuya pendiente es la mayor debido a la transformacion de la austenita a perlita. En la Figura 11(d) se muestra en detalle la curva correspondiente a la evolución de la fracción volumétrica de austenita durante las transformaciones eutectoide estable y metaestable junto a las transformaciones de grafito, ferrita y perlita, en la misma se distinguen tres tramos: el primero comprendido entre IEE1 (correspondiente a $T^{\alpha}_{a_T}$) y IEE2 (correspondiente a $T^{\alpha}_{A_1}$) donde la pendiente de la curva de la fracción de austenita es pequeña debido a que los granos de ferrita recién nuclean y a que la fuerza impulsora para su crecimiento, dada por el valor de $(C_C^{\gamma/\alpha} - C_{\gamma C})$ es pequeño; el segundo comprendido entre IEE2 y IEM (correspondiente a $T_{a_T}^P$), durante el cual se produce un marcado aumento de la pendiente de la curva de la transformación de la austenita debido al crecimiento de los granos de ferrita y al aumento del valor de $(C_C^{\gamma/\alpha} - C_{\gamma_C})$ a medida que la temperatura disminuye; y finalmente, el tercer tramo se extiende desde IEM hasta que la austenita transforma totalmente. El marcado aumento de la velocidad de transformación de la austenita correspondiente al segundo y al tercer tramo, tiene su origen en, por un lado el crecimiento de los granos de ferrita una vez nucleados y al aumento del valor de $(C_C^{\gamma/\alpha} - C_{\gamma_C})$; y por otro lado, al crecimiento cooperativo del grafito, de la ferrita y de la perlita, prevaleciendo la elevada velocidad de crecimiento de la perlita debido a la difusión de corto alcance del carbono entre las láminas de ferrita y de carburo de hierro, lo cual se observa claramente en la pendiente de la curva de la fracción volumétrica de perlita en la misma figura.

En la Figura 11(e) se grafica una parte de la curva de enfriamiento correspondiente a las transformaciones eutectoide estable y metaestable junto a las zonas y límites mencionados anteriormente. En ésta se observa que la recalescencia se da cuando la fracción volumétrica de perlita comienza a ser considerable, siendo prácticamente constante la pendiente de la curva de enfriamiento desde IEE1 hasta IEM, a partir de cuyo instante la curva de enfriamiento presenta una marcada recalescencia, la cual se debe tanto a la elevada velocidad de crecimiento de las colonias de perlita, como al mayor calor latente de la perlita en relación con la ferrita (Tabla 2).

En la Figura 11(f) se grafica la evolución de la fracción volumétrica de grafito junto a la demarcación de las zonas correspondientes a las diferentes etapas del crecimiento de los nódulos de grafito. La primera comprendida entre IS y FS (inicio y fin de la solidificación respectivamente), la segunda entre FS y IEE1, y finalmente entre IEE1 y FTsEs (fin de las transformaciones eutectoides). El porcentaje de la fracción volumétrica total de grafito correspondiente a cada una de las tres zonas es: 57,34%, 27,28% y 15,38% respectivamente.

En la Figura 11(g) se grafica la evolución de la fracción volumétrica de ferrita junto a los puntos correspondientes a los períodos comprendidos en el intercrítico eutectoide estable, y por debajo del límite inferior de dicho intervalo. Claramente, se pone de manifiesto que casi la totalidad de la ferrita crece por debajo del intercrítico eutectoide estable, lo cual sugiere que la mayor parte del crecimiento de dicha fase se debe al carbono que difunde desde la austenita hacia los nódulos de grafito, siendo, en este caso, la contribución del carbono que difunde hacia la asutenita irrelevante.

En la Figura 11(h) se muestra la evolución de la fracción volumétrica de perlita, en esta puede verse que la nucleación de las colonias finaliza prontamente debido a la recalescencia alcanzada ni bien iniciada esta transformación, otra característica importante en la curva es la variación de su pendiente a medida que la transformación avanza, lo cual se debe al coeficiente de choque tenido en cuenta en la Expresión 9.

Finalmente, en las Figuras 11(i), 11(j), y 11(k), se grafican la evolución de los porcentajes en peso del manganeso, del cobre, y del silicio en función de la fracción sólida (f_s) . La importancia de los valores de las concentraciones de estos elementos en las PZS $(f_l = 1)$, y en las UZS $(f_l = 0)$, donde f_l es la fracción líquida, se debe a que son los empleados para calcular los límites de los intervalos intercríticos eutectoide estable y metaestable a partir de cuyos valores



comienzan ambas transformaciones (Carazo, 2012).

(a) Temperatura y fracciones de fase transformadas.



(e) Evolución de la temperatura y de las fracciones de ferrita y perlita durante las transformaciones eutectoides.



(f) Evolución de la fracción de grafito.

5.2. Influencia de la velocidad de enfriamiento

En esta sub-sección se presentan los principales resultados obtenidos al variar uno de los valores de las dos variables a partir de las cuales se obtiene una fundición nodular, en particular: la velocidad de enfriamiento.

En la Figura 12(a) se grafican las curva de enfriamiento para los diferentes flujos de extracción de calor considerados, en ésta se observa como a medida que el valor de q aumenta,



(i) Evolución del manganeso en función de la fracción sólida.

fraccion solida (%)



(h) Evolución de la fracción de perlita.



(j) Evolución del cobre en función de la fracción sólida.



(k) Evolución del silicio en función de la fracción sólida.

Figura 11: Resultados correspondientes al caso base.

también lo hace la pendiente de la curva de enfriamiento. A su vez y tal como se muestra en la Figura 12(b), el tiempo total de solidificación disminuye a medida que el valor de q aumenta.

En la Figura 12(c) se muestran en detalle las mesetas correspondientes a las transformaciones eutectoide estable y metaestable. De esta figura se deduce que los sobreenfriamiento son mayores, y que las recalescencias comienzan antes, son mayores y de menor extensión a medida el valor de la velocidad de enfriamiento aumenta.

En la Figura 12(d) se muestra como ha medida que la velocidad de enfriamiento aumenta, el espaciamiento entre las ramas secundarias de las dendritas de austenita (SDAS) disminuye, y junto con éste, también lo hará el tamaño de las células eutécticas, lo cual conduce a una

microestructura de solidificación más fina y una distribución de las micro-segregaciones más uniforme tal como lo describe (Rivera, 2000).

En las Figuras 12(e), 12(f) y 12(g); se grafican los porcentajes en peso del silicio, del cobre y del manganeso correspondientes a las últimas zonas en solidificar. A partir de estos resultados se demuestra cómo a medida que la velocidad de enfriamiento es mayor, los porcentajes en peso de los elementos que segregan negativamente, tales como el silicio y el cobre, aumentan en las UZS, en tanto los que micro-segregan positivamente; tal como el manganeso, disminuye en las UZS.

En las Figuras 12(h) y 12(i) se grafican las fracciones volumétricas de grafito y de ferrita en función de la velocidad de enfriamiento respectivamente. En ambas figuras se observa que tanto el porcentaje de grafito como el de la ferrita disminuye a medida que la velocidad de enfriamiento aumenta.

Finalmente, y tal como se observa en la Figura 12(j), la fracción volumétrica de perlita aumenta a medida que la velocidad de enfriamiento también lo hace.



(a) Comparación de las curvas de enfriamientos.



(c) Comparación de las mesetas correspondientes a las transformaciones eutectoides.



(b) Comparación de los tiempos totales de solidificación.



(d) Comparación del espaciado entre las ramas secundarias de las dendritas de austenita.

5.3. Influencia de la composición química

En esta sub-sección se presenta un análisis del comportamiento del modelo presentado en la Sección 4 frente a la variación de los porcentajes en peso inicial de silicio. Se analiza su influencia en las curvas de enfriamiento durante las transformaciones de fase en estado sólido y en algunos de los principales resultados del modelo micro-estructural presentado en la misma sección.



(e) Comparación del silicio en las últimas zonas en solidificar.



(g) Comparación del manganeso en las últimas zonas en solidificar.



(i) Comparación de la fracción volumétrica de ferrita.



(f) Comparación del cobre en las últimas zonas en solidificar.



(h) Comparación de la fracción volumétrica de grafito.



(j) Comparación de la fracción volumétrica de perlita.

Figura 12: Principales resultados obtenidos con la variación de la velocidad de enfriamiento.

En la Figura 13(a) se observa que la variación en las curvas de enfriamiento solo es apreciable levemente durante la solidificación y en los cambios de fase eutectoides estable y metaestable.

En la Figura 13(b) se muestra un detalle de las zonas de las curvas de enfriamiento correspondientes a las transformaciones eutectoide estable y metaestable. En esta figura se aprecia que a medida que el porcentaje en peso de silicio aumenta; las recalescencias comienzan más tarde, son menores y de menor extensión.

En las Figuras 13(c) y 13(d) se grafican los procentajes de las fracciones volumétricas de grafito y de ferrita respectivamente. A partir de la gráfica mostrada en ambas figuras; se observa

que a medida que el porcentaje en peso inicial de silicio aumenta, los valores de las fracciones de ambas fases también lo hacen. Esto se debe a que medida que el contenido de silicio crece, las transformaciones de fase tienden a llevarse a cabo según el sistema estable Fe-C-Si.

En la Figura 13(e) se muestra que al aumentar el porcentaje inicial de silicio, la fracción volumétrica de perlita tiende a disminuir. Esto se debe a lo mencionado en el párrafo anterior y al carácter competitivo de las transformaciones eutectoides estable y metaestable.

En las Figuras 13(f) y 13(g) se grafican los valores de las diferencias entre los límites inferiores y superiores correspondientes a los intercríticos eutectoide estable y metaestable respectivamente. En ambas figuras se muestra que al aumentar el contenido inicial de silicio, el valor de ambas diferencias aumenta, lo cual se traduce en una mayor fracción volumétrica de grafito y de ferrita al final de la transformación difusional de la austenita (tal como se demostró en las Figuras 13(c) y 13(d)), debido a que para una misma velocidad de enfriamiento, la aleación tiene más tiempo para que la austenita transforme según el sistema estable Fe-C-Si sin que entre en competencia con el sistema metaestable Fe-C-Si al aumentar la cantidad de silicio.



(a) Comparación de las curvas de enfriamientos.



(c) Comparación de la fracción volumétrica de grafito.



(b) Comparación de las mesetas correspondientes a las transformaciones eutectoides.



(d) Comparación de la fracción volumétrica de ferrita.

6. CONCLUSIONES

En este artículo se han presentado los principales resultados de un nuevo modelo de las transformaciones difusionales de la austenita durante el enfriamiento continuo de una fundición nodular y su comportamiento frente a la variación de algunas de las principales variables asociadas a los procesos de las fundiciones.



(e) Comparación de la fracción volumétrica de perlita.



(f) Comparación de la diferencia entre los límites superiores de los intercríticos eutectoides estable y metaestable.



(g) Comparación de la diferencia entre los límites inferiores de los intercríticos eutectoides estable y metaestable.

Un resumen de las principales conclusiones que se desprenden del estudio paramétrico llevado a cabo en este artículo se desarrolla en los siguientes dos puntos:

- A medida que la velocidad de enfriamiento aumenta, los tiempos locales y totales de solidificación y de las transformaciones eutectoides disminuyen. Durante las transformaciones eutectoides los sobreenfriamientos son mayores y las recalescencias comienzan antes, son mayores y de menor extensión. Además y de acuerdo a lo reportado por Rivera (2000), el SDAS disminuye, y junto con éste, también lo hará el tamaño de las células eutécticas lo cual conducirá a una microestructura de solidificación más fina y a una distribución de las micro-segregaciones más uniforme. Las concentraciones de los elementos que micro-segregan negativamente, tales como el silicio y el cobre, tienden a aumentar en las UZS; en tanto los que micro-segregan positivamente, tal como el manganeso, disminuyen. Finalmente, los porcentajes de grafito y de ferrita disminuyen; en tanto el de la perlita aumenta.
- Al aumentar al contenido inicial de silicio, en las curvas de enfriamiento solo se observa una variación durante la solidificación y en los cambios de fase eutectoides estable y metaestable. En estos dos últimos cambios de fase, las recalescencias comienzan más tarde, son menores y de menor extensión. Las fracciones de grafito y ferrita aumentan, y

Figura 13: Principales resultados obtenidos con la variación del contenido de silicio.

la fracción de perlita disminuye. Por otro lado, las diferencias entre los límites inferiores y superiores correspondientes a los intercríticos eutectoide estable y metaestable aumentan.

REFERENCIAS

- Aagaard R., Hattel J., Schäfer W., Svensson I.L., y Hansen P.N. Simulation vs. reality of an industrial ductile iron casting. *AFS Transactions*, 104:659–667, 1996.
- Almansour A., Matsugi K., Hatayama T., y Yanagisawa O. Simulation solidification of spheroidal graphite cast iron of the fe-c-si system. *Materials Transactions*, *JIM*, 37(4):612– 619, 1996.
- Banerjee D. y Stefanescu D.M. Structural transitions and solidification kinetics of sg cast iron during directional solidification experiments. *AFS Transactions*, 99:747–759, 1991.
- Boeri R.E. *The Solidification of Ductile Cast Iron*. Tesis de Doctorado, The University of British Columbia, Canadá, 1989.
- Brandt W.H. Solution of the diffusion equation applicable to the edgewise growth of pearlite. *Journal of Applied Physics*, 16(3):139–146, 1945.
- Cahn J.W. On the kinetics of the pearlite reaction. Transactions AIME, 209:140, 1957.
- Capdevilla C., Caballero F.G., y García De Andrés C. Neural network model for isothermal pearlite transformation. part i: Interlamellar spacing. *ISIJ International*, 45(2):229–237, 2005a.
- Capdevilla C., Caballero F.G., y García de Andrés C. Neural network model for isothermal pearlite transformation. part ii: Growth rate. *ISIJ International*, 45(2):238–247, 2005b.
- Carazo F.D. *Modelado termo-metalúrgico del enfriamiento de una fundición nodular de*. Tesis de Doctorado, Facultad de Ciencias Exactas Físicas y Naturales. Universidad Nacional de Córdoba, Córdoba, Argentina, 2012.
- Celentano D.J. *Un modelo termo-mecánico para problemas de solidificación de metales*. Tesis de Doctorado, Universitat Politècnica de Catalunya, Escola Tècnica Supèrior de'Enginyers de Camins, Canals i Ports, Barcelona, España, 1994.
- Chang S., Shangguan D., y Stefanescu D.M. Prediction of microstructural evolution in sg cast iron from solidification to room temperature. *AFS Transactions*, 99:531–541, 1991.
- Chang S., Shangguan D., y Stefanescu D.M. Modeling of the liquid/solid and the eutectoid phase transformations in spheroidal graphite cast iron. *Metallurgical Transactions A*, 23A:1333–1346, 1992.
- Charbon C. y Rappaz M. 3d stochastic modelling of nodular cast iron solidification. *Advanced Materials Research*, 4-5:453–460, 1997.
- 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.
- Dardati P.M. *Simulación Micromecánica de la Solidificación de la Fundición Dúctil*. Tesis de Doctorado, Facultad de Ciencias Exactas Físicas y Naturales. Universidad Nacional de Córdoba, Córdoba, Argentina, 2005.
- Frás E., Kapturkiewicz W., y Burbelko A. Computer modeling of primary structure formation in ductil iron. *Advanced Materials Research*, 4-5:499–504, 1997.
- Hashiguchi K. y Kirkaldy J.S. Pearlite growth by combined volume and phase boundary diffusion. *Scandinavian Journal of Metallurgy*, 13(4):240–248, 1984.
- Hillert M. The formation of pearlite. Transactions AIME, 209:170, 1957.

- Hillert M. The role of interfaces in phase transformations. *Institute of Metals Monograph*, (33):231–247, 1969. In: Mechanism of Phase Transformations in Crystalline Solids.
- Kapturkiewicz W., Fraś E., y Burbelko A.A. Computer simulation of the austenitizing process in cast iron with pearlitic matrix. *Materials Science and Engineering A*, 413-414:322–333, 2005.
- 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 i: 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.
- Nakajima K., Apel M., y Steinbach I. The role od carbon diffusion in ferrite on the kinetics of cooperative growth of pearlite: A multiphase field study. *Acta Materialia*, 54:3665–3672, 2006.
- Noguchi T. y Nagaoka R. Three dimensional distribution of graphite nodules in spheroidal graphite cast iron. *AFS Transactions*, 93:115–122, 1985.
- Ohnaka I. Progress in computer simulation of casting of spheroidal graphite cast irons in japan. *International Journal of Cast Metals Research*, 11(5):267–272, 1999. Special Issue.
- Oldfield W. A quantitative approach to casting solidification, freezing of cast iron. *Transactions* of the American Society for Metals, 59:945–961, 1966.
- Pandit A.S. y Bhadeshia H.K.D.H. Mixed diffusion controlled growth of pearlite in binary steel. *Proceedings of Royal Society A*, 467(2126):508–521, 2011.
- Puls M.P. y Kirkaldy J.S. The pearlite reaction. *Metallurgical Transactions A*, 3:2777–2796, 1972.
- Rivera G. *Estructura de solidificación de fundiciones de hierro con grafito esferoidal*. Tesis de Doctorado, Univesidad Nacional de Mar del Plata (INTEMA), Mar del Plata, Argentina, 2000.
- Rivera G., Boeri R.E., y Sikora J. Influence of the solidification microstructure on the mechanical properties of ductile iron. *International Journal of Cast Metals Research*, 11(5), 1999.
- Roviglione A.N. y Hermida J.D. From flake to nodular: A new theory of morphological modification in gray cast iron. *Metallurgical Transactions B*, 35B(2):313–330, 2004.
 Scheil E. 37:123, 1946.
- Shapiro J.M. y Kirkaldy J.S. Theory of decomposition of eutectoids assuming local equilibrium and phase boundary diffusion. *Acta Metallurgica*, 16(4):579–585, 1968.
- 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.M. Science and Engineering of Casting Solidification. Springer, 2009.
- Stefanescu D.M. y Kanetkar C.S. Computer modeling of the solidification of eutectic alloys: The case of cast iron. In D.J. Srolovitz, editor, *Computer Simulation of Microstructural Evolution*, páginas 171–188. The Metallurgical Society, Toronto, Canadá, 1985.
- Sundquist B.E. The edgewise growth of pearlite. *Acta Metallurgica*, 16(12):1413–1427, 1968. Turnbull D. Theory of cellular precipitation. *Acta Metallurgica*, 3:55–63, 1955.

Venugopalan D. Computer modeling of ferrite and pearlite formation in ductile iron. In G. Ohi-

ra, T. Kusakawa, y E. Niyama, editores, *The Physical Metallurgy of Cast Iron. Proceedings of the Fourth International Symposium on the Physical Metallurgy of Cast Iron*, páginas 271–278. Materials Research Society, Tokyo, Japan, 1989.

- Venugopalan D. A kinetic model of the $\gamma \rightarrow \alpha + gr$ eutectoid transformation in spheroidal graphite cast irons. *Metallurgical Transactions A*, 21A:913–918, 1990.
- Wenzhen L. y Baicheng L. Microstructure simulation and properties prediction of spheroidal graphite iron castings. In *Proceedings of 62ND WORLD FOUNDRY CONGRESS*. Philadelphia, Pennsylvania, USA, 1996.
- Wessén M. y Svensson I.L. Modeling of ferrite growth in nodular cast iron. *Metallurgical Transactions A*, 27A:2209–2220, 1996.
- Zener C. Kinetics of the decomposition of austenite. Transactions AIME, 167:550–595, 1946.