

ANÁLISIS DE LA SOLIDIFICACIÓN DE LA FUNDICIÓN NODULAR: SIMULACIÓN Y VALIDACIÓN EXPERIMENTAL

Patricia M. Dardati^a, Arturo A. Chiarella^b, Luciano Manavella^a, Diego J. Celentano^c,
Bernd Schulz^c y Luis A. Godoy^d

^a*Departamento de Ingeniería Mecánica, Facultad Regional Córdoba - Universidad Tecnológica Nacional, M. López y Cruz Roja Argentina, Córdoba, Argentina, pdardati@industrial.frc.utn.edu.ar*

^b*Departamento de Ingeniería Metalúrgica, Universidad de Santiago de Chile (USACH), Av. Bdo. O'Higgins 3363, Santiago, Chile.*

^c*Departamento de Ingeniería Mecánica, Universidad de Santiago de Chile (USACH), Av. Bdo. O'Higgins 3363, Santiago, Chile, dcelenta@lauca.usach.cl*

^d*Facultad de Ciencias Exactas, Físicas y Naturales, Universidad Nacional de Córdoba, Av. Vélez Sarsfield 1601, Córdoba, Argentina, lgodoy@com.uncor.edu*

Keywords: Fundición dúctil, solidificación, microestructura, simulación numérica.

Abstract. En este trabajo se presenta un estudio del proceso de solidificación de fundiciones nodulares ligeramente hipereutécticas. Para tal fin se simula el comportamiento termo-microestructural de la aleación en ensayos realizados en una copa estandarizada. En dichos ensayos se registraron curvas de enfriamiento en un punto central de la pieza y se cuantificaron, por medio de metalografía, la cantidad y tamaño de los nódulos de grafito una vez finalizado el enfriamiento. Los modelos de análisis se basan en las teorías uni y multinodular. Por último, las predicciones numéricas se discuten y validan con las mediciones experimentales.

1 INTRODUCCION

Para la producción de piezas de formas complicadas el método de colada y moldeo resulta mucho más conveniente que otros procedimientos tales como el maquinado o la deformación del material. Sin embargo la obtención de piezas sanas y microestructuras adecuadas no es una tarea sencilla. Entre los variados defectos que se pueden presentar cabe mencionar los de carácter macroscópico como rechupes, deformaciones y fisuras y aquellos de carácter microscópico como tamaño de grano inadecuado o presencia de componentes no deseados. La importancia de la microestructura reside en su gran influencia sobre las propiedades mecánicas del material.

Los factores que afectan al resultado de un proceso de colada y moldeo son numerosos y la interacción entre ellos muy compleja. Es por eso que el diseño, tanto del proceso como de la pieza, requiere de una gran experiencia y en muchos casos de costosas etapas de prueba y error. Esto hace de la modelización y la simulación numérica herramientas de gran utilidad ya que contribuyen a la disminución de los largos y onerosos ensayos con prototipos. Indudablemente el tratamiento numérico de un fenómeno físico requiere de investigaciones de carácter experimental, no sólo para permitir el mejor y más profundo conocimiento del proceso que se desea simular sino también para posibilitar la validación del modelo. Pero el aporte de métodos numéricos puede ser importante a fin de reducir el número y tipo de ensayos a ser llevados a cabo en laboratorio.

Son numerosos los materiales, puros y aleaciones, utilizados para la obtención de piezas por solidificación en moldes, actualmente las llamadas genéricamente fundiciones, aleaciones de hierro con porcentajes de carbono superiores al 2%, son materiales muy utilizados a nivel mundial. Entre ellas, la llamada fundición dúctil o también fundición nodular o de grafito esferoidal adquiere cada día mayor importancia en la industria ya que, debido a que en ella el grafito se presenta en forma de pequeños nódulos, posee muy buenas propiedades mecánicas.

Durante un proceso de enfriamiento normal de una fundición nodular en un molde de arena, desde la temperatura de colada hasta la temperatura ambiente, ocurren básicamente dos cambios de fase. Uno constituido por el pasaje de líquido a sólido (solidificación), cuyo desarrollo varía dependiendo de si la composición de la aleación es hipoeutéctica, eutéctica o hipereutéctica y otro, llamado cambio de fase eutectoide, que se produce con el material en estado sólido. Ambos cambios de fase están constituidos por procesos de nucleación y crecimiento de grano que dependen, entre otros, de factores tales como la composición química del material, la velocidad de enfriamiento y la inoculación. Los productos de la solidificación tienen influencia en el cambio de fase eutectoide.

Actualmente existen dos teorías explicativas del proceso de solidificación de la fundición nodular de composición eutéctica, por un lado la teoría uninodular y por otro la teoría plurinodular (Sikora et al. 2001). En este trabajo se simula computacionalmente el proceso de solidificación de una probeta sencilla de fundición nodular de composición ligeramente hipereutéctica utilizando tres modelos numéricos diferentes, dos de ellos basados en la teoría plurinodular y el otro en la teoría uninodular. Los resultados numéricos son comparados con registros experimentales obtenidos en ensayos realizados en la Universidad de Santiago de Chile.

En la Sección 2 se presentan los aspectos principales del trabajo experimental. En la Sección 3 se muestran las fórmulas más importantes empleadas en los modelos de simulación numérica. La comparación entre los registros experimentales y los resultados de los cálculos computacionales se presentan en la Sección 4. Por último, en la Sección 5, se exponen las conclusiones.

2 PROCEDIMIENTO EXPERIMENTAL

Los registros empíricos utilizados en este trabajo para compararlos con resultados numéricos corresponden a un estudio experimental llevado a cabo por [Chiarella \(2005\)](#) en la Universidad de Santiago de Chile. En dicho estudio se colaron probetas estandarizadas tipo Quick-Cup utilizando fundición nodular de composición ligeramente hipereutéctica. Un esquema de la probeta puede verse en la [Figura 1](#). A través de termocupas tipo K (cromel-alumel), ubicadas en el centro de las probetas, se registraron las curvas de enfriamiento desde la temperatura de colada hasta la temperatura ambiente. Se obtuvieron micrografías de distintas zonas de las copas y se analizaron las fases componentes caracterizando los nódulos de grafito presentes.



Figura 1: Vistas superior y lateral de la copa Quick-Cup con la termocupla tipo K protegida por un tubo de cuarzo. Foto extraída de [Chiarella \(2005\)](#).

El material utilizado fue fundido en horno de inducción y la carga consistió en:

- Chatarra de acero de calidad comercial: 28%
- Fundición nodular de retorno: 70%
- Grafito: 0,5%
- Fe-Si 75%: 2,5 %

Los porcentajes anteriores se expresan con respecto al peso de la carga total.

Los tratamientos de inoculación y nodularización se realizaron por el Método Sándwich que consiste en colocar en la cuchara el inoculante y el nodulizante y cubrirlos con chapas de acero y virutas de acero o fundición nodular, vaciando luego el metal líquido del horno. El tratamiento del líquido se llevó a cabo con:

- Nodulizante Fe-Mg: 1,0 %
- Inoculante Fe-Si 75%: 0,3

Se realizaron dos coladas. Se llenaron 10 probetas, cinco con la colada #0 y cinco con la colada #1. La composición química de cada grupo de probetas puede verse en la [Tabla 1](#) y [Tabla 2](#).

C	Si	Mn	S	P	Mo	Ni	Cu	Al	V	Cr	CE
3,64	2,37	0,21	0,043	0,049	0,01	0,04	0,01	0,001	0,001	0,06	4,43

Tabla 1: Composición química de las probetas 1 a 5, obtenidas con la colada #0.

C	Si	Mn	S	P	Mo	Ni	Cu	Al	V	Cr	CE
3,60	2,49	0,26	0,043	0,047	0,01	0,04	0,01	0,001	0,001	0,05	4,43

Tabla 2: Composición química de las probetas 6 a 10, obtenidas con la colada #1.

El carbono equivalente CE que se indica en la última columna de las tablas fue calculado con la fórmula siguiente

$$\%CE = \%C + \frac{\%Si}{3} \quad (1)$$

Las probetas fueron numeradas del 1 al 10 según valores decrecientes de temperatura de colada, como se muestra en la [Tabla 3](#).

probeta	T [°C] colada
1	1245,6
2	1239,7
3	1233,6
4	1226,3
5	1221,1
6	1202,8
7	1200,5
8	1195,7
9	1191,6
10	1187,3

Tabla 3: Numeración de las probetas según la temperatura de colada.

En la [Figura 2](#) pueden verse las curvas de enfriamiento registradas por las termocuplas ubicadas en los centros de las 10 probetas coladas. Si bien los registros se realizaron hasta la

temperatura ambiente sólo se muestra la zona anterior a la transformación eutectoide que no será simulada numéricamente.

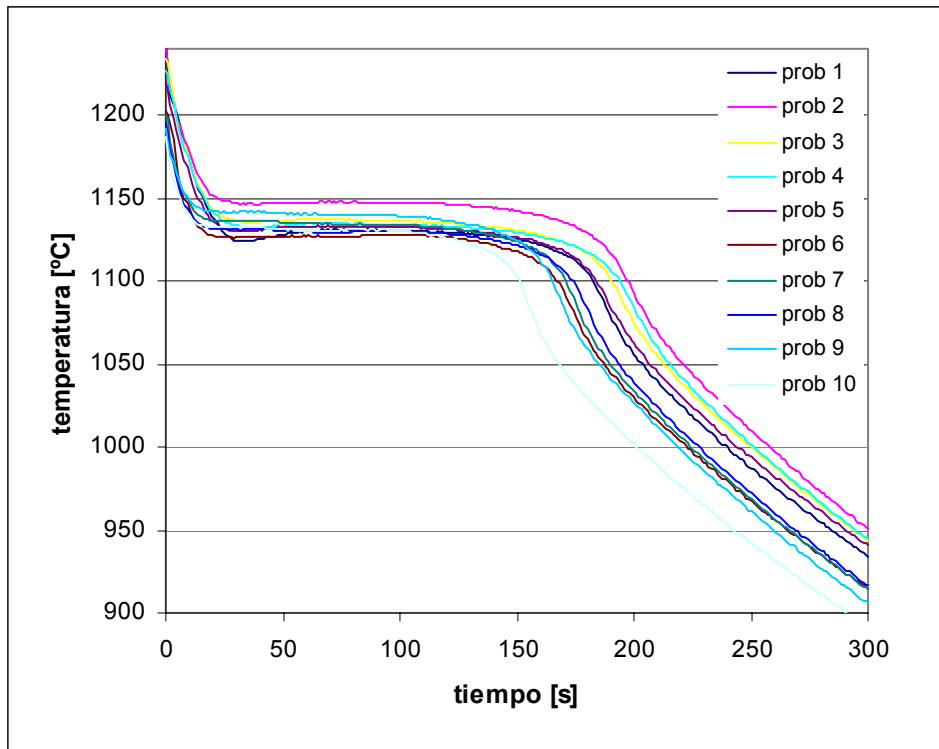


Figura 2: Curvas de enfriamiento experimentales.

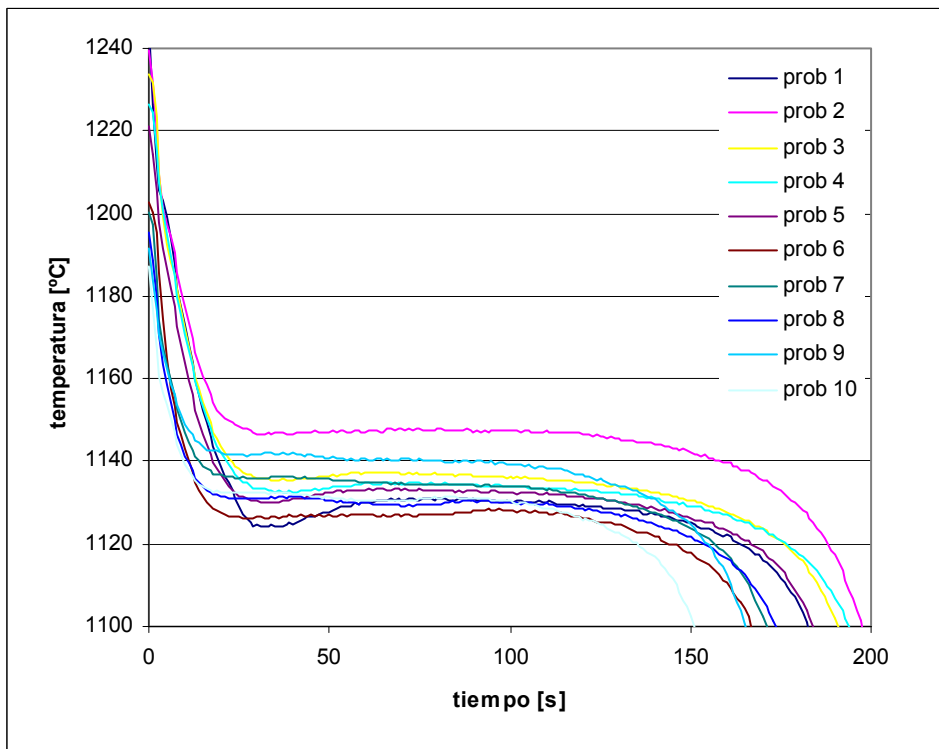


Figura 3: Curvas de enfriamiento experimentales. Ampliación de la zona de solidificación.

La **Figura 3** presenta una ampliación de la zona correspondiente a la solidificación.

Por tratarse de composiciones ligeramente hipereutécticas el proceso de solidificación debe iniciarse con la aparición de nódulos de grafito cuando la temperatura alcanza el valor correspondiente al equilibrio entre líquido y grafito, T_{GL} , y continuar con la transformación eutéctica cuando la temperatura alcanza el valor correspondiente T_E . El inicio de los dos cambios de fase mencionados debería mostrar un cambio de pendiente (disminución de la velocidad de enfriamiento) en la curva temperatura versus tiempo. Sin embargo, observando las curvas experimentales dichos cambios no resultan evidentes. Estos sólo se aprecian cuando se hace una derivación punto a punto de las curvas mediante un software adecuado. Esto podría deberse a una baja nucleación inicial o bien a valores altos de velocidad de enfriamiento. Las curvas presentan distintos sobreenfriamientos aún cuando pertenezcan a probetas de igual composición y no existe una relación coherente entre esos sobreenfriamientos y las temperaturas de colada, única variable “conocida” que difiere de una probeta a otra. El sobreenfriamiento depende en gran medida del nivel de nucleación y éste a su vez está relacionado con la inoculación, por lo tanto, una explicación de los diferentes sobreenfriamientos que presentan las curvas registradas podría ser una falta de homogeneidad en la distribución del inoculante. A partir de las curvas de enfriamiento registradas y por medio de un software específico se realizó un análisis diferencial. El estudio arrojó la información que se muestra en la **Tabla 4** en la que se aprecia para cada probeta la temperatura y el tiempo de momentos característicos del proceso de solidificación. Siendo T_{GL} la temperatura de liquidus en la que se inicia la solidificación del grafito primario, T_{ES} la temperatura de inicio del cambio de fase eutéctico, T_{EU} la temperatura de sobreenfriamiento eutéctico a partir de la cual se detiene el enfriamiento, T_{ER} la temperatura máxima alcanzada durante la recalescencia y T_{EE} la temperatura a la que finaliza la solidificación.

Prob	T de colada [°C]	T_{GL} [°C]	tiempo T_{GL} [s]	T_{ES} [°C]	tiempo T_{ES} [s]	T_{EU} [°C]	tiempo T_{EU} [s]	T_{ER} [°C]	tiempo T_{ER} [s]	T_{EE} [°C]	tiempo T_{EE} [s]
1	1245,6	1205,7	3	1143,5	18	1124,5	34	1130,8	83	1090,8	186
2	1239,7	1191,2	5	1160,5	15	1146,8	36	1147,3	79	1084,6	203
3	1233,6	1177,1	9	1151,9	16	1135,7	37	1137,1	70	1101,8	190
4	1226,3	1170,9	10	1147,9	17	1132,5	37	1134,6	76	1078,4	202
5	1221,1	1172,7	9	1144,0	17	1130,2	36	1133,4	70	1082,6	192
6	1202,8	1157,9	7	1137,2	13	1126,1	28	1127,8	103	1088,3	173
7	1200,5	1174,3	4	1149,7	10	1136,2	24	1136,0	45	1087,0	176
8	1195,7	1154,2	7	1139,5	12	1130,5	24	1130,9	47	1074,0	184
9	1191,6	1158,7	7	1147,3	12	1141,8	26	1142,3	38	1094,5	168
10	1187,3	1156,6	5	1139,5	11	1132,3	22	1132,0	45	1075,1	159

Tabla 4: Caracterización de las curvas de enfriamiento experimentales.

Todas las curvas de enfriamiento muestran pendientes iguales después de la finalización de la solidificación lo que indicaría que la evacuación del calor es la misma en todos los casos.

El análisis microestructural de cantidad y distribución de tamaño de nódulos que se realiza en [Chiarella \(2005\)](#) y que se utiliza en este trabajo para la validación de los modelos numéricos corresponde a la probeta número cuatro. Las zonas elegidas para la toma de las muestras se señalan en la **Figura 4** y las coordenadas aproximadas de cada punto pueden verse en la **Tabla 5**.

El nódulo de menor tamaño observado en las ocho muestras tiene un diámetro de 10,084 micrones y el de mayor tamaño posee un diámetro de 62,116 micrones. Teniendo en cuenta esto y para facilitar la interpretación y comparación de resultados se agruparon los nódulos según su tamaño en 10 familias. En la **Tabla 6** pueden verse los valores de los radios que corresponden a cada familia.

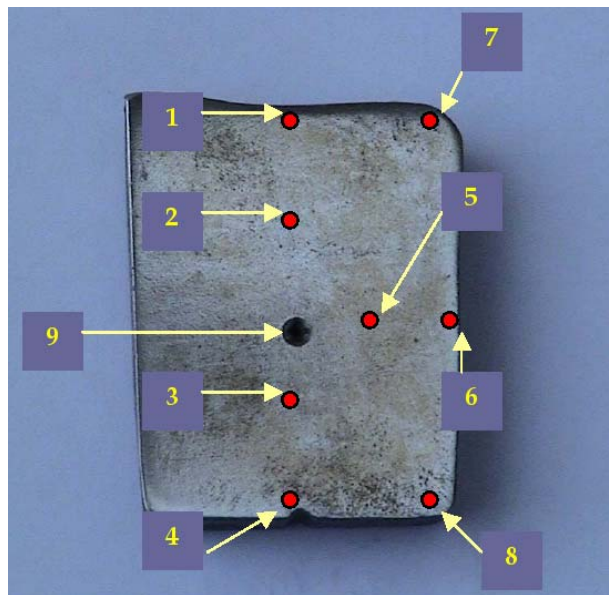


Figura 4: Ubicación de los puntos en los que se realiza el análisis microestructural. La superficie corresponde a una sección de simetría longitudinal de la probeta, perpendicular a la termocupla. Foto extraída de [Chiarella \(2005\)](#).

Punto	Coordenada aprox. [mm]
1	(0;0;43)
2	(0;0;3,2)
3	(0;0;1,0)
4	(0;0;0)
5	(0;8;19)
6	(0;18;19)
7	(0;16;42)
8	(0;16;0)
9	(0;0;19)

Tabla 5: Coordenadas de los puntos analizados.

Familia	Intervalo Radio [μm]
0	0 - 5
1	5 - 8
2	8 - 11
3	11- 13
4	13 -17
5	17 - 20
6	20 - 23
7	23 - 26
8	26 - 29
9	29 - 32
10	32 -35

Tabla 6: Definición de los intervalos de radio que forman cada familia.

3 MODELOS NUMÉRICOS DE SOLIDIFICACIÓN

La resolución numérica se lleva a cabo acoplando dos niveles de análisis. El tratamiento de la ecuación del calor se realiza a nivel macroestructural por el método de los elementos finitos, mientras que el análisis del proceso de solidificación se realiza a nivel microestructural mediante leyes de nucleación y crecimiento.

En este trabajo la simulación numérica del cambio de fase de líquido a sólido es analizada con tres modelos microestructurales diferentes. Dos de ellos basados en la teoría plurinodular, y el restante basado en la teoría uninodular. Para la simulación según la teoría plurinodular se emplean un modelo basado en una propuesta realizada por Boeri (Boeri, 1989; Dardati et al. 2002), al que llamaremos B, y otro desarrollado por Dardati (Dardati, 2005; Dardati et al. 2004) al que designaremos DGC. El cálculo uninodular se lleva a cabo siguiendo el planteo de Su (Su et al. 1984; Dardati, 2005), al que identificaremos como S. Explicaciones detalladas de los modelos que se utilizan en este trabajo pueden encontrarse en las referencias señaladas. Los tres modelos consideran la solidificación equiaxial de una fundición nodular de composición eutéctica.

En todos los cálculos las concentraciones de equilibrio de carbono en las interfases se obtuvieron mediante las siguientes expresiones (Heine, 1986; Boeri, 1989):

$$C^{l/\gamma} = \frac{1}{97.3}(1569 - T - 24.32Si) \quad (2)$$

$$C^{\gamma/l} = \frac{1}{177.9}(1528.4 - T - 32Si) \quad (3)$$

$$C^{l/gr} = \frac{1}{389.1}(T - 129.7Si + 503.2) \quad (4)$$

$$C^{\gamma/gr} = \frac{(T - 1154.6 - 6.5Si)(1.5 - 0.216Si)}{(354.6 + 6.5Si)} + 2.1 - 0.216Si \quad (5)$$

siendo $C^{l/\gamma}$, $C^{\gamma/l}$, $C^{l/gr}$ y $C^{\gamma/gr}$, las concentraciones de carbono de equilibrio para la temperatura, T , del líquido en contacto con la austenita, de la austenita en contacto con el líquido, del líquido en contacto con el grafito y de la austenita en contacto con el grafito respectivamente. Si es la concentración de silicio del líquido y se calcula en cada paso de tiempo usando la ley de Scheil.

La temperatura eutéctica se obtiene mediante la expresión

$$T_E = 1154.6 + 6.5Si \quad (6)$$

3.1 Ley de nucleación del grafito

La nucleación del grafito se simula mediante la misma ley en los tres modelos. Esto facilita la comparación de los resultados. Los nódulos de grafito comienzan a nuclear cuando se alcanza la temperatura eutéctica y la nucleación continúa hasta que termina la solidificación, pudiendo interrumpirse momentáneamente si la temperatura del punto aumenta y mientras no descienda por debajo de la más baja alcanzada por dicho punto hasta ese momento. La ley de nucleación del grafito utilizada está dada por la siguiente fórmula exponencial (Boeri, 1989)

$$\frac{\partial N_{gr}}{\partial t} = b\Delta T \exp\left(-\frac{c}{\Delta T}\right)(1-f_s) \quad (7)$$

donde b y c son parámetros constantes para una determinada composición y tratamiento del líquido, N_{gr} la densidad de nódulos de grafito, f_s la fracción sólida y ΔT el sobreenfriamiento del líquido ($T_E - T$). El modelo DGC considera dos zonas de nucleación, el líquido interdendrítico (zona 2) y el líquido intergranular (zona 3) (Dardati, 2005).

3.2 Ley de nucleación de la austenita

Los modelos S y B no consideran nucleación para la austenita. El modelo S supone un grano de austenita esférico rodeando cada nódulo de grafito y el modelo B calcula la cantidad de austenita presente en el sólido empleando la regla de la palanca. El modelo DGC sí tiene en cuenta la nucleación independiente de la austenita utilizando la siguiente ley

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

en la que N_γ es la densidad de granos de austenita y A un parámetro que depende del tratamiento del líquido. La nucleación de la austenita depende de la velocidad de enfriamiento, se considera instantánea y comienza cuando la temperatura llega al valor de la temperatura eutéctica T_E . El número de granos de austenita determina el tamaño de grano final de dicha fase (Dardati, 2005).

3.3 Leyes de crecimiento de los nódulos de grafito

Según el modelo S los nódulos de grafito son rodeados por una cápsula esférica de austenita inmediatamente después de nuclear, por lo tanto, su crecimiento se produce por difusión del carbono desde el líquido hasta los nódulos a través de la capa de austenita. La ley de crecimiento propuesta por Su es la siguiente

$$\frac{dR_{gr}}{dt} = \frac{(C^{\gamma/l} - C^{\gamma/gr})}{(C^{gr} - C^{\gamma/gr})} \frac{\rho_\gamma}{\rho_{gr}} D_c^\gamma \frac{1}{R_{gr} \left(1 - \frac{1}{2,4}\right)} \quad (9)$$

donde ρ_l y ρ_{gr} son las densidades del líquido y del grafito respectivamente, D_c^γ es el coeficiente de difusión del carbono en la austenita y R_{gr} es el radio del nódulo de grafito.

El modelo B propone que los nódulos de grafito crecen inicialmente en contacto directo con el líquido según la ecuación de Zener de crecimiento de una partícula esférica aislada en una matriz de baja supersaturación,

$$R_{gr}^2 = \frac{C^{l/\gamma} - C^{l/gr}}{C^{gr} - C^{l/gr}} \frac{\rho_l}{\rho_{gr}} D_c^l t \quad (10)$$

donde D_c^l es el coeficiente de difusión del carbono en el líquido. Una vez que los nódulos alcanzan un radio de 6 micrones se supone que los nódulos ya han sido rodeados por austenita y a partir de ese momento la ley de crecimiento empleada por el modelo es

$$\frac{dR_{gr}}{dt} = 1.911 \frac{(C^{\gamma/l} - C^{\gamma/gr})}{(C^{gr} - C^{\gamma/gr})} \frac{\rho_\gamma}{\rho_{gr}} D_c^\gamma \frac{(1-f_s)^{2/3}}{R_{gr}} \quad (11)$$

El modelo DGC considera el volumen del grano de austenita dividido en tres zonas y

supone que los nódulos incluidos en la zona 1, ya rodeados por la austenita, no crecen mientras que los nodos presentes en las zonas 2 y 3 crecen según las ecuaciones (12) y (13) respectivamente

$$\frac{dR_{gr}}{dt} = \frac{D_c^l (C^{l/\gamma'} - C^{l/gr}) \rho_l}{R_{gr} (C^{gr} \rho_{gr} - C^{l/gr} \rho_l)} \quad (12)$$

$$\frac{dR_{gr}}{dt} = \frac{D_c^l (C_{pro}' - C^{l/gr}) \rho_l}{R_{gr} (C^{gr} \rho_{gr} - C^{l/gr} \rho_l)} \quad (13)$$

La diferencia entre las dos ecuaciones anteriores reside en la concentración del líquido que rodea a los nódulos de grafito y que para los nódulos ubicados en la zona 2 es el líquido interdendrítico de concentración $C^{l/\gamma'}$, y para los nódulos de la zona 3 es el líquido intergranular de concentración C_{pro}' . En ambas concentraciones la comilla indica que el valor es el calculado después del crecimiento de la austenita.

3.4 Crecimiento de la austenita

El modelo S considera que la austenita forma una capa esférica alrededor de los nódulos de grafito inmediatamente después que estos aparecen en el líquido. Durante la solidificación la envoltura de austenita aumenta su espesor, manteniendo su forma esférica, según la siguiente ley

$$\frac{dR_\gamma}{dt} = D_c^\gamma \frac{(C^{\gamma/l} - C^{\gamma/gr})}{R_\gamma \left(-1 + \frac{R_\gamma}{R_{gr}} \right) (C^{l/\gamma} - C^{\gamma/l})} \quad (14)$$

siendo R_γ el radio de la esfera de austenita. El modelo S considera que cuando se ha alcanzado un porcentaje de solidificación del 50% la velocidad de crecimiento de la austenita disminuye debido a la interferencia entre los granos y, para esa etapa del proceso, propone la siguiente ley de crecimiento

$$\frac{dR_\gamma}{dt} = D_c^l \frac{R_{gr} (C^{\gamma/l} - C^{\gamma/gr})}{R_\gamma (-R_{gr} + R_\gamma) (C^{l/\gamma} - C^{\gamma/l})} \left(\frac{1 - f_s}{1 - 0.5} \right)^{2/3} \quad (15)$$

El modelo B considera que la relación entre la cantidad de austenita y la cantidad de grafito se mantiene constante, sin depender del sobreenfriamiento, y está dada por la regla de la palanca aplicada al eutéctico de equilibrio, resultando:

$$f_\gamma = \frac{100 - C_E}{C_E - C_{TE}} f_{gr} \quad (16)$$

donde f_γ y f_{gr} son las fracciones de austenita y grafito respectivamente y C_{TE} es la concentración límite de carbono en la austenita a temperatura eutéctica.

En el cálculo del crecimiento de la fase austenita en el modelo DGC intervienen la ecuación (17) (Pang y Stefanescu, 1996) que establece el crecimiento de la punta de las dendritas principales, y la ecuación (18), que determina el incremento del radio de la zona esférica 1 (R_n) cuyo volumen es igual a la suma del volumen de austenita más el de los

nódulos que ya han sido rodeados por dicha fase y que, según este modelo, han dejado de crecer.

$$\frac{dR_g}{dt} = \frac{k D_c^l m C_0}{2 \pi^2 \Gamma (k-1)} \left(\frac{C^{l\gamma} - C_{\infty g}}{C_0} \right)^2 \quad (17)$$

En la ecuación (17), R_g es el radio de la superficie esférica determinada por las puntas de las dendritas principales del grano equiaxial de austenita, m es la pendiente de la línea de líquidus de la austenita T_{AL} , Γ es el coeficiente de Gibbs-Thompson, C_0 es la concentración de carbono inicial, k es el coeficiente de partición que relaciona las concentraciones de sólido y líquido en equilibrio y $C_{\infty g}$ es la concentración de carbono en el líquido intergranular fuera de la zona límite con las puntas de las dendritas de austenita y después del crecimiento del grafito.

$$R_n' = \sqrt[3]{\frac{3 D_c^l R_g^2 \left. \frac{dC}{dr} \right|_{R_g} \Delta t + C^{l\gamma} (1-k) R_n^3 + (C^{l\gamma} - C^{l\gamma}) R_g^3}{C^{l\gamma} (1-k) + (C^{l\gamma} - C^{l\gamma})}} \quad (18)$$

En la ecuación (18) Δt es el paso de tiempo, R_n es el radio de la zona 1. Los valores sin tilde corresponden al paso de tiempo t y los que tienen tilde al paso de tiempo $t + \Delta t$.

4 COMPARACIÓN DE RESULTADOS NUMÉRICOS Y EXPERIMENTALES

Teniendo en cuenta que por el momento las razones que pueden argumentarse para explicar la diferencia en las curvas de enfriamiento experimentales de las distintas probetas coladas durante el ensayo son sólo hipótesis y con el propósito de reducir el volumen de las comparaciones que se presentan en este trabajo, se adopta la probeta 4 para los fines de validación de los modelos numéricos. Es importante resaltar que entre los registros experimentales la curva de enfriamiento de la probeta 4 está ubicada en la zona intermedia.

Para la simulación numérica, dada la simetría del conjunto probeta molde, el cálculo se realiza discretizando sólo un cuarto del mismo. Se utilizan elementos hexaédricos de 8 nodos, 1500 para el molde y 1000 para la pieza. Se emplean además elementos de contacto para simular el flujo de calor entre la pieza y el molde, y elementos superficiales para representar la extracción de calor por convección en las superficies exteriores (en contacto con el aire) de la pieza y del molde.

En la [Tabla 7](#) se resumen los valores de los parámetros y coeficientes correspondientes a la fundición utilizados en los cálculos. En la [Tabla 8](#) pueden verse las propiedades de la arena que fueron extraídas de [Midea y Shah \(2002\)](#). En la [Tabla 9](#) se indican los valores de la conductancia de los elementos de contacto.

La [Figura 5](#) muestra las curvas de enfriamiento de los nueve puntos señalados en la [Figura 4](#) obtenidas con el modelo DGC. Puede apreciarse que, en el cálculo, el punto que solidifica más rápidamente es el 7 y el que lo hace más lentamente el 4. Lo mismo ocurre con los modelos S y B.

FUNDICIÓN			
Conductividad [W/m°C]:		Calor específico [kJ/kg °C]:	
T	Conduc	T	C.esp.
280	44,1	20	500
420	40,9	600	750
560	37,1	800	750
700	33,6	1145	820
840	28,1	1155	840
980	22,5	1400	840
1120	18,8		
1250	120,0		
Densidad [kg/m ³]:		7000	
Calor latente [kJ/kg]:		230	
Coef. de difusión del carbono [m ² /s]:		$D_c^l = 5.0 \times 10^{-10}$ $D_c^{\gamma} = 9.0 \times 10^{-11}$	
Parámetros de nucleación grafito:		$b = 4.0 \times 10^{13}$ [n° grano/m ³ °C s] $c = 340$ [°C]	
Parámetro de nucleación austenita [n° grano s/m ³ °C]:		$A = 1.0 \times 10^7$	
Coeficiente de Gibbs-Thompson [°K m]:		$\Gamma = 2.0 \times 10^{-7}$	
Concentraciones iniciales:		$C_0 = 3.64$ $Si_0 = 2.37$	

Tabla 7: Propiedades de la fundición utilizadas en el cálculo.

ARENA			
Temperatura	Conductividad [W/m°C]:	Densidad [kg/m3]:	Calor específico [kJ/kg °K]:
100	0.478	1561	1045
200	0.505	1557	1071
300	0.505	1553	1096
400	0.516	1548	1120
500	0.511	1542	1143
600	0.507	1535	1167
700	0.507	1530	1191
800	0.517	1526	1215
900	0.547	1522	1238
1000	0.600	1518	1262
1100	0.682	1512	1285
1200	0.805	1508	1309
1300	0.973	1503	1333
1400	1.194	1498	1356

Tabla 8: Propiedades de la arena utilizadas en el cálculo.

Temp.	Conductancia [J/s . m2 . °C] (Contacto pieza - molde)
20	500
1170	1000
1400	1000

Tabla 9: Conductancia de los elementos de contacto utilizada en el cálculo.

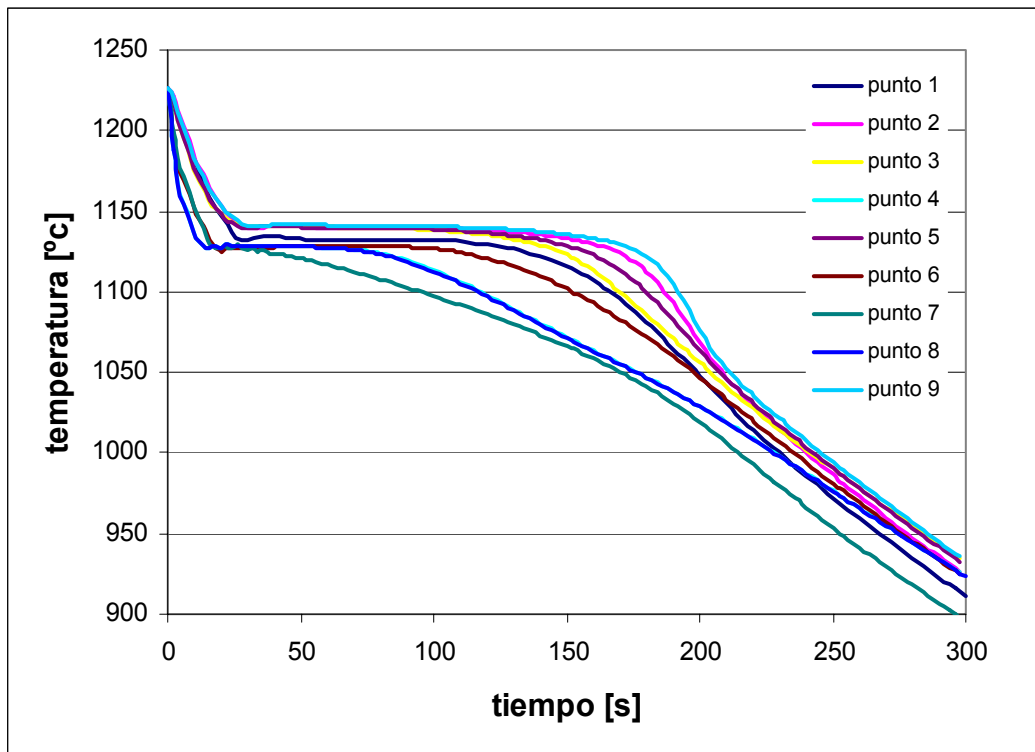


Figura 5: Curvas de enfriamiento obtenidas con el modelo DGC.

En la [Figura 6](#) se muestran las curvas de enfriamiento para el punto 9 calculadas con los distintos modelos numéricos y la registrada experimentalmente mediante la termocupla ubicada en el centro de la probeta 4. Se observa que después de finalizada la solidificación las curvas calculadas tienen una pendiente muy parecida a la de la curva experimental, de esto podría inferirse que las propiedades asignadas a la arena y a los elementos de contacto y de superficie serían adecuadas. Las pendientes correspondientes a la primera etapa del enfriamiento, que pueden observarse con más detalle en la ampliación realizada en la [Figura 7](#), difieren entre sí siendo la mayor la de la curva experimental. Esto resulta inesperado si consideramos que la fundición utilizada para las probeta es ligeramente hipereutéctica por lo cual su solidificación debe comenzar a la temperatura de líquidus del grafito que es más alta que la temperatura eutéctica a la que comienza la solidificación en los cálculos (los modelos utilizados sólo simulan transformación eutéctica). Una posible causa de la diferencia mencionada podría residir en la existencia de un fenómeno de convección del líquido que no es simulado en los cálculos (aunque sí se considera una conductividad del material superior a la correspondiente a las temperaturas elevadas antes de la solidificación). También podría deberse a la protección de cuarzo que cubre a la termocupla en los ensayos.

Puede verse que la curva obtenida con el modelo S es la que presenta el mayor sobreenfriamiento mientras que en la conseguida con el modelo DGC se observa el menor sobreenfriamiento. La totalidad de la meseta de la curva experimental se desarrolla a temperaturas menores a las correspondientes de las simulaciones numéricas.

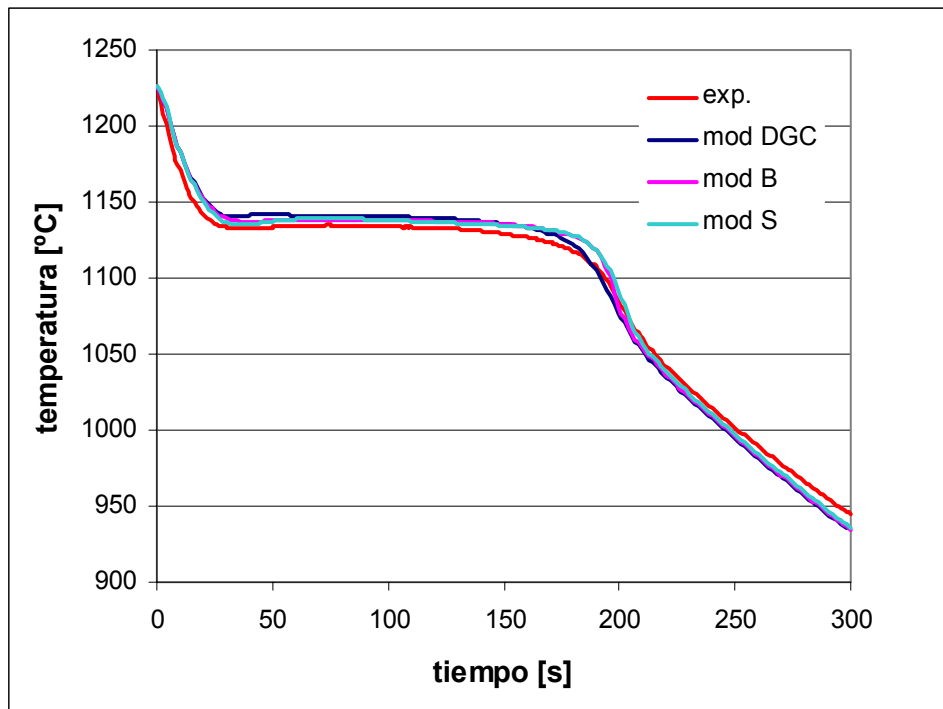


Figura 6: Curvas de enfriamiento del punto 9. Numéricas y experimentales.

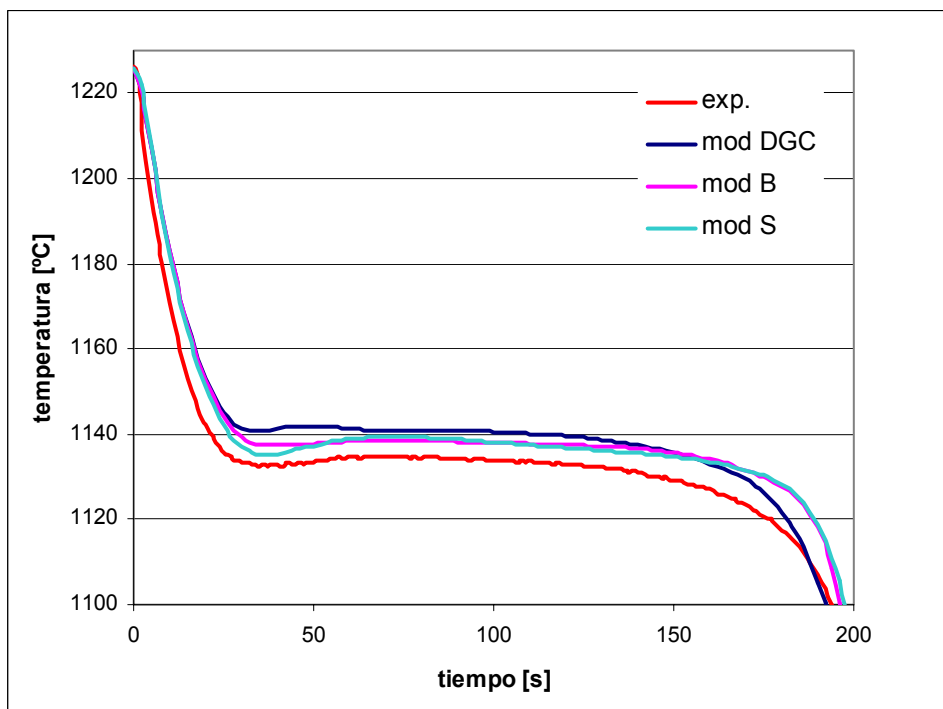


Figura 7: Curvas de enfriamiento del punto 9. Ampliación de la zona de solidificación.

La Figura 8 muestra la evolución de las fracciones de líquido, austenita y grafito durante la solidificación para el punto 9 obtenidas mediante el cálculo numérico.

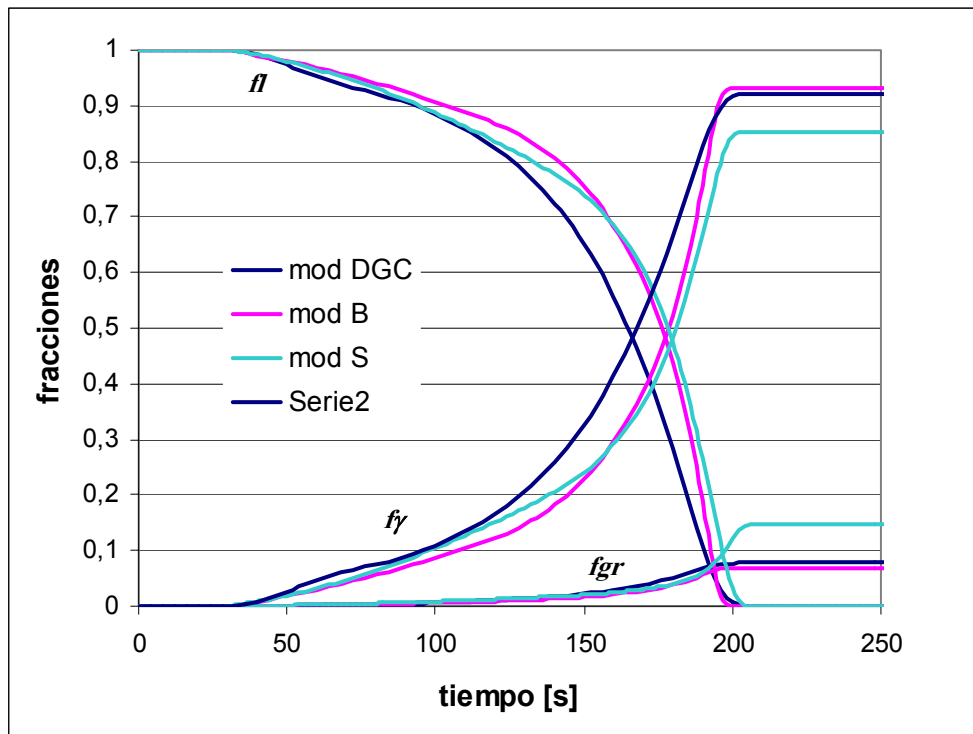


Figura 8: Evolución de las fracciones de líquido, austenita y grafito durante la solidificación.

Se observa que los porcentajes finales de austenita y grafito obtenidos en los cálculos realizados con los modelos DGC y B son muy similares, no ocurre lo mismo con los resultados del modelo S que presenta una clara diferencia, siendo mayor el porcentaje de grafito y menor el de austenita. El gráfico de la Figura 9 muestra el porcentaje final de grafito obtenido con los cálculos y experimentalmente en los puntos señalados.

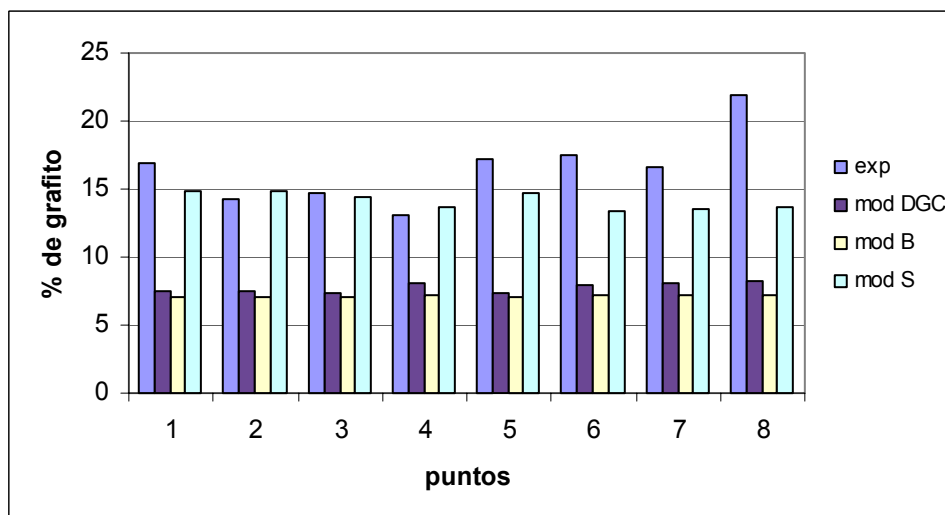


Figura 9: Porcentaje de grafito obtenido en cada punto experimentalmente y por simulación.

Es posible ver que en la mayoría de los puntos el porcentaje mayor de grafito lo presentan los resultados experimentales y el resultado numérico que más se aproxima al empírico es el obtenido con el modelo S. Los porcentajes finales de grafito obtenidos con los modelos DGC y B son similares entre sí e inferiores a los experimentales y a los del modelo S. En el caso del

modelo DGC la causa podría residir en que dicho modelo supone que el crecimiento de los nódulos se detiene una vez que éstos han sido rodeados por la austenita. Sin embargo también se debe considerar que algunos autores (Boeri, 1989) sostienen que el carbono sigue precipitando en forma de grafito durante el enfriamiento y que en fundiciones de matriz enteramente ferrítica el volumen de grafito puede incrementarse hasta en un 59%. También se debe tener en cuenta que, como ya se mencionó, la composición de la fundición colada es ligeramente hipereutéctica lo que indica que la solidificación debe comenzar con la nucleación y crecimiento de grafito proeutéctico, situación que no es posible representar con los modelos utilizados debido a que los mismos sólo contemplan el caso de la solidificación eutéctica.

Desde la Figura 10 a la Figura 17 se muestra la comparación entre las densidades de nódulos calculadas y las observadas en el ensayo para los distintos puntos señalados en la Figura 4 y para las distintas familias. El gráfico de la Figura 18 muestra la cantidad total de nódulos para cada punto.

Analizando los gráficos es posible ver que la causa por la cual con el modelo S se obtienen fracciones de grafito mayores a las calculadas con los otros dos modelos no es una mayor densidad de nódulos sino la presencia de nódulos de mayor tamaño. En la Figura 18 se puede ver que la cantidad total de esferas de grafito calculadas con el modelo S es inferior en todos los puntos a las correspondientes densidades obtenidas experimentalmente y con el modelo DGC.

El modelo DGC presenta en todos los casos densidades de nódulos elevadas en la familia 0, no ocurriendo lo mismo con los otros dos modelos y con las mediciones experimentales. Esto puede deberse a que el modelo DGC detiene el crecimiento de los nódulos de grafito cuando éstos quedan rodeados por austenita, es decir entran en la zona 1 (Dardati, 2005) o bien a una elevada nucleación sobre el final del proceso de solidificación. Según los conteos experimentales en todos los puntos existe una continuidad en la variación de los radios de los distintos nódulos de manera que no existen familias intermedias que no contengan nódulos. Esto sí ocurre en los resultados numéricos: por ejemplo el punto 6 no tiene nódulos en las familias 3 y 5 y para el punto 8 se encuentra vacía la familia 4. Esto también ocurre, en distintos puntos y familias, con los modelos B y S. Una posible causa de esto podría ser la interrupción de la nucleación cuando comienza la recalcancia y la reanudación de la misma cuando la temperatura vuelve a descender (por debajo de la más baja alcanzada hasta ese momento).

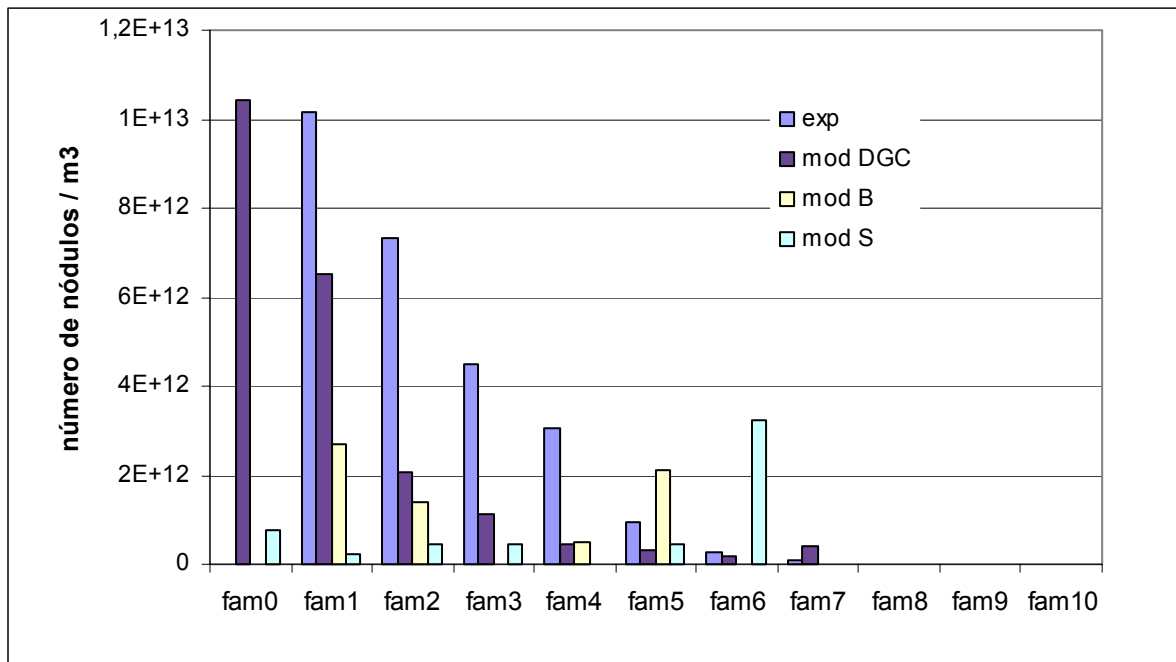


Figura 10: Número de nódulos de las distintas familias para el punto 1.

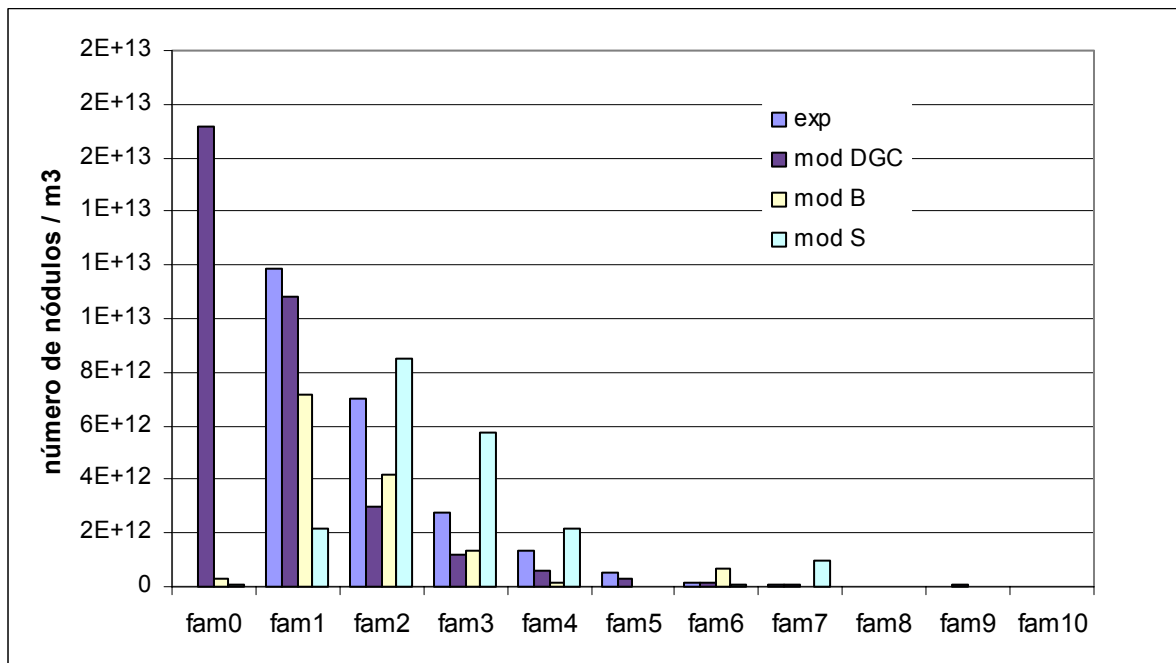


Figura 11: Número de nódulos de las distintas familias para el punto 2.

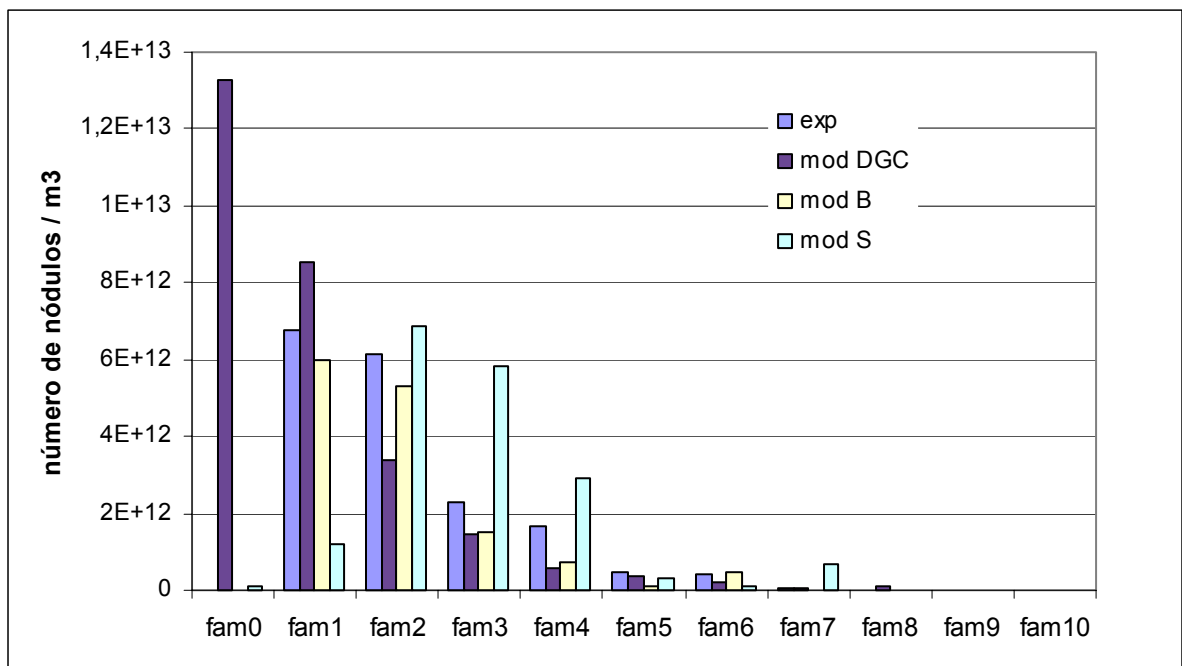


Figura 12: Número de nódulos de las distintas familias para el punto 3.

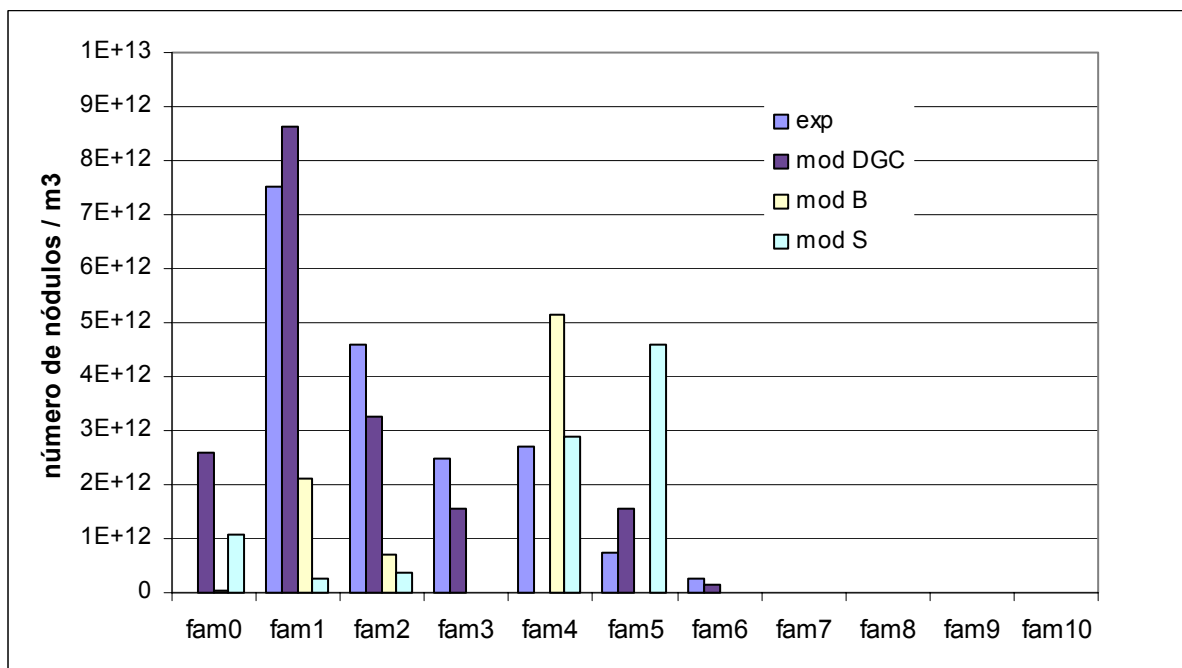


Figura 13: Número de nódulos de las distintas familias para el punto 4.

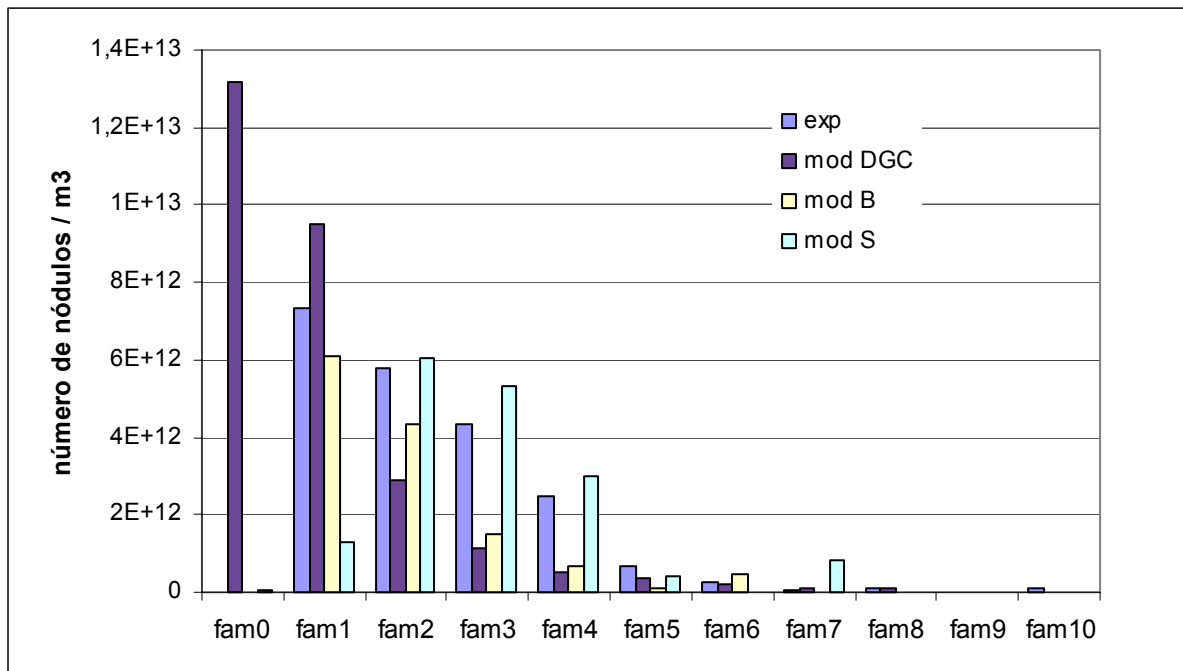


Figura 14: Número de nódulos de las distintas familias para el punto 5.

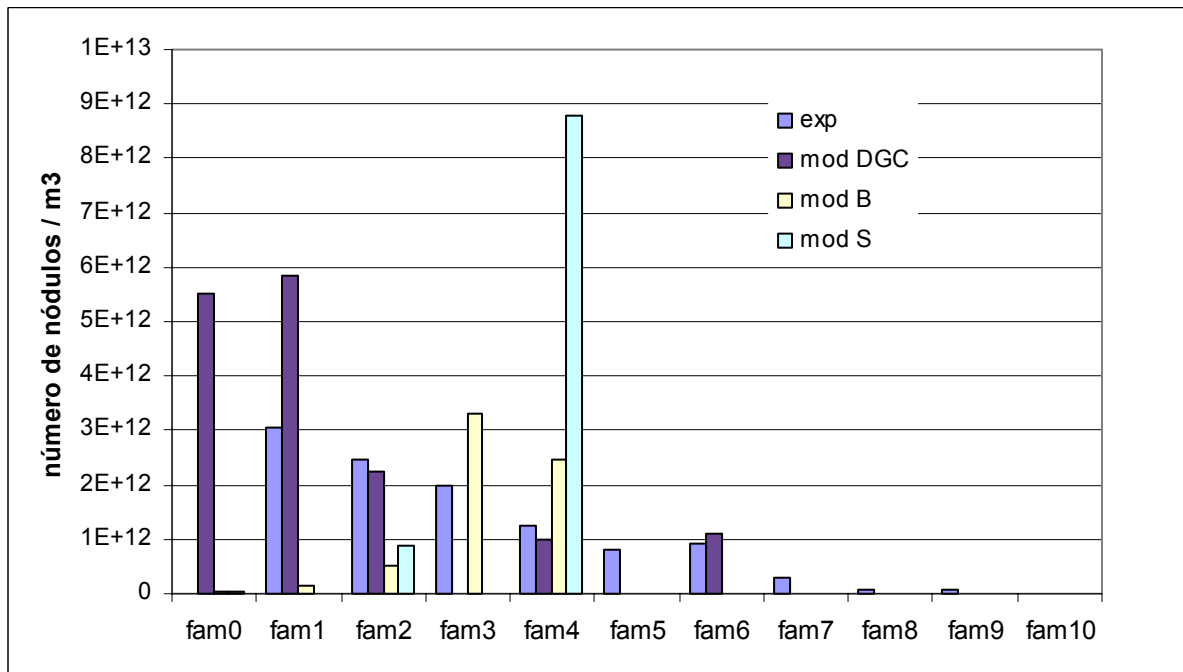


Figura 15: Número de nódulos de las distintas familias para el punto 6.

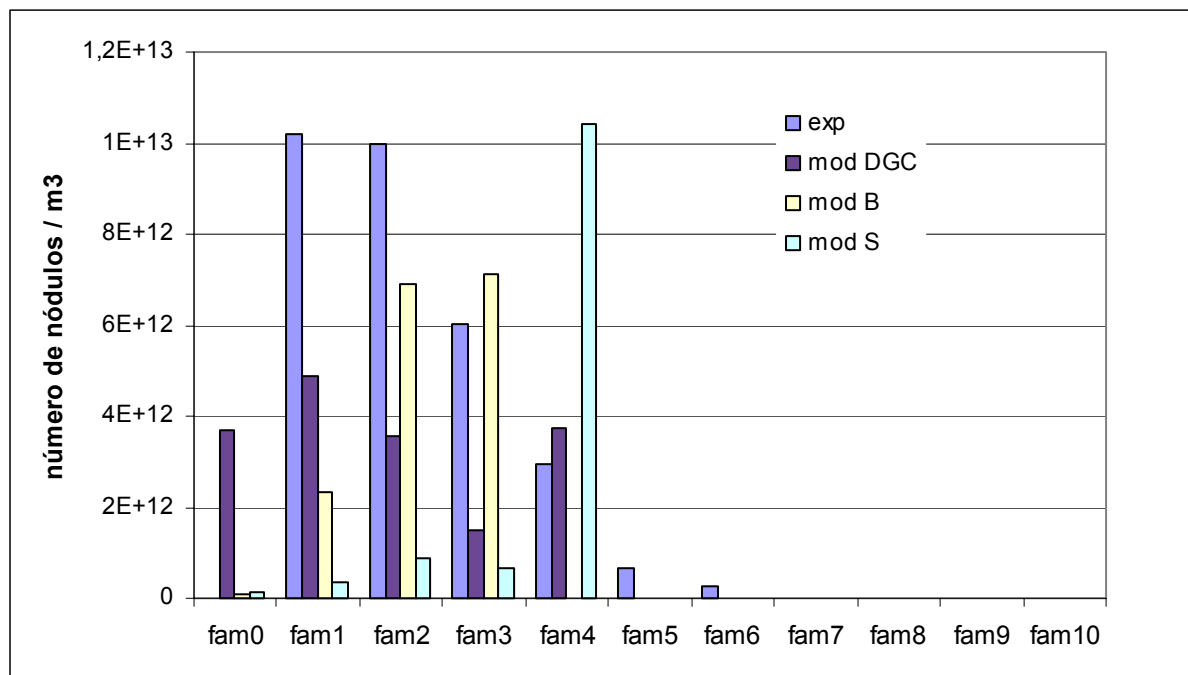


Figura 16: Número de nódulos de las distintas familias para el punto 7.

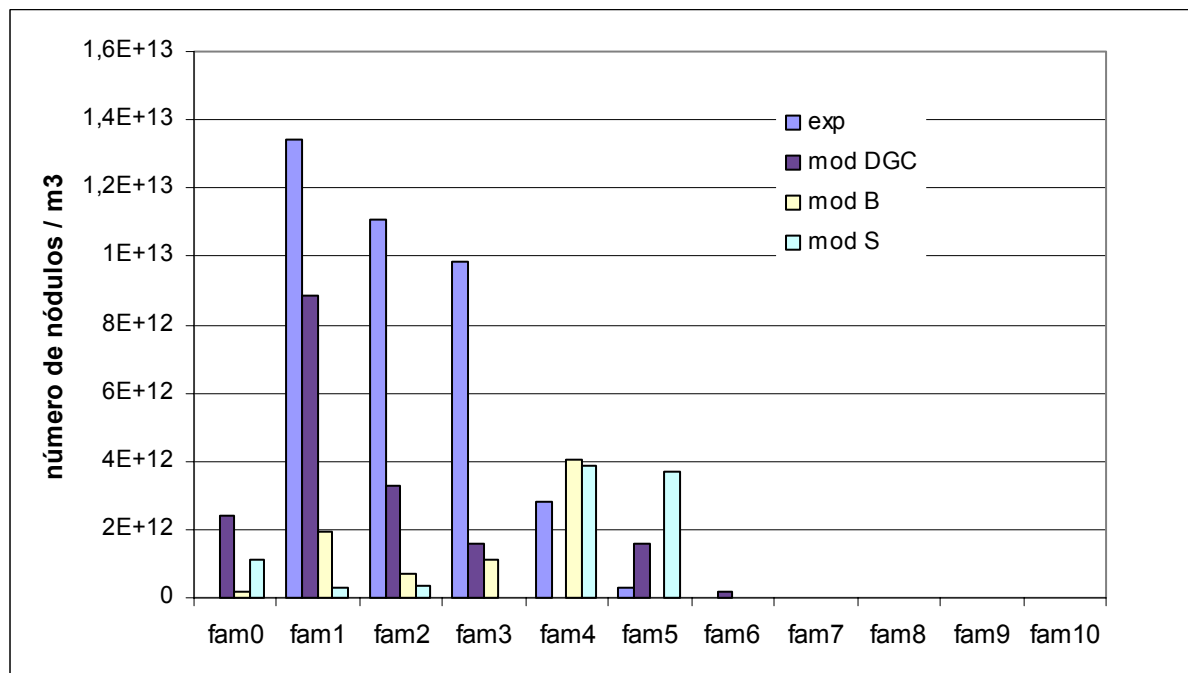


Figura 17: Número de nódulos de las distintas familias para el punto 8.

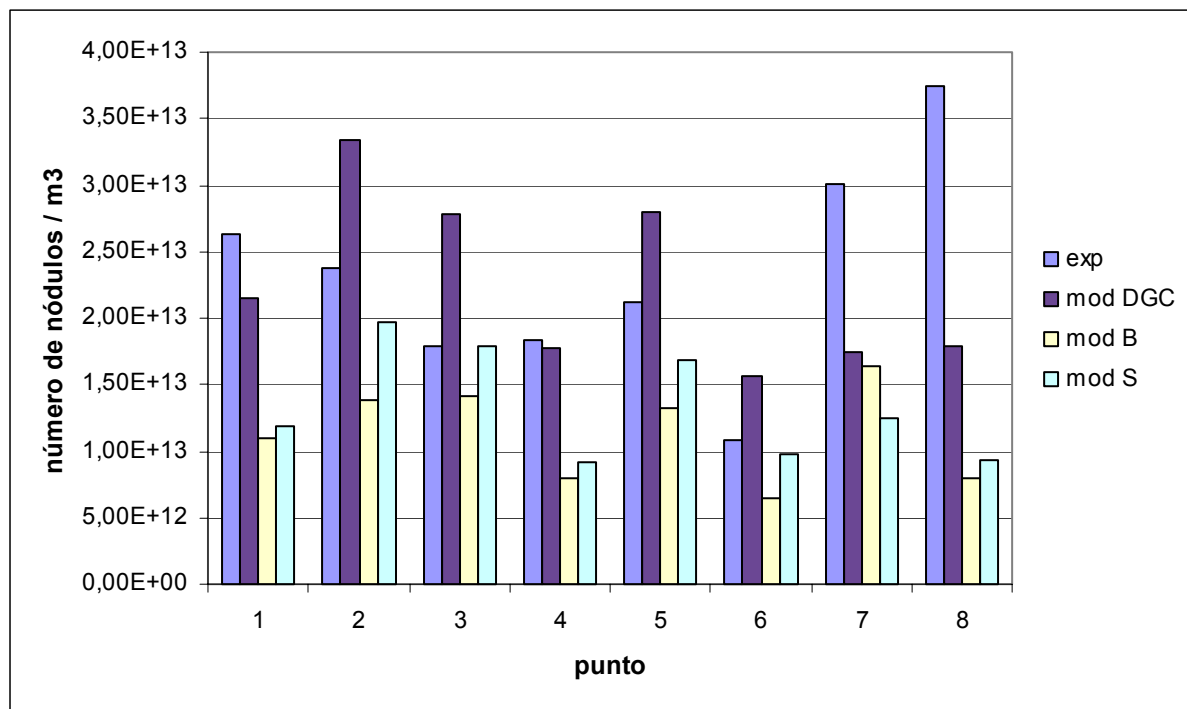


Figura 18: Número total de nódulos por m^3 en cada punto.

5 CONCLUSIONES

En este trabajo se compararon los resultados obtenidos experimentalmente, en un proceso de colada y moldeo de una probeta tipo Quick-Cup con fundición nodular, con los producidos mediante simulaciones numéricas realizadas con tres modelos microestructurales de solidificación diferentes.

En general, las curvas de enfriamiento calculadas y la empírica resultan muy próximas entre sí. La curva T versus t experimental presenta una pendiente mayor en el comienzo del enfriamiento y el desarrollo del proceso de solidificación se da a temperaturas ligeramente inferiores a las correspondientes de las curvas calculadas.

El porcentaje final de grafito obtenido con el modelo S es el que más se aproxima a los registrados experimentales; sin embargo, la cantidad de nódulos calculada con dicho modelo es inferior a la experimental en todos los puntos analizados menos en el punto 3 en el que son iguales. Los modelos B y DGC dan porcentajes finales de grafito similares entre sí y aproximadamente un 50 % menores a los experimentales en todos los puntos observados. Del modelo B resultan cantidades totales de nódulos inferiores a las del ensayo mientras que con el modelo DGC se obtienen cantidades superiores en algunos puntos e inferiores en otros.

Las diferencias que se observan entre el número y tamaño de nódulos y el porcentaje final de grafito calculados y experimentales requiere la revisión de algunos aspectos del modelo, tales como las condiciones de nucleación del grafito y la implementación de la solidificación del grafito proeutéctico para las composiciones hipereutécticas.

Este trabajo ilustra también las dificultades del modelado de fenómenos físicos complejos, en los que la evidencia experimental no puede ser controlada de manera completa y los modelos procuran representar el fenómeno sobre la base de los parámetros que incluyen. El proceso de ajuste permanente de los modelos, como lo aportado en este trabajo, debe hacerse en la medida que se disponga de nueva evidencia empírica.

6 AGRADECIMIENTOS

Los autores agradecen los apoyos otorgados por CONICYT (Proyecto FONDECYT 1060139) y DICYT-USACH. L.A. Godoy es miembro de la carrera del investigador de CONICET en Argentina.

REFERENCIAS

- R. Boeri. The Solidification of Ductile Cast Iron. *Tesis Doctoral*, University of British Columbia, Canadá, 1989.
- A. Chiarella. Análisis experimental y numérico de la solidificación de las fundiciones nodulares. *Memoria de titulación*, Universidad de Santiago de Chile, 2005.
- P. Dardati, D. Celentano, L. Godoy y R. Boeri. Simulación numérica del proceso de solidificación de la fundición dúctil. *Mecánica Computacional*, Vol. XXI, 2855-2874, 2002.
- P. Dardati, L. Godoy y D. Celentano. Microstructural simulation of solidification process of spheroidal-graphite cast iron. *Journal of Applied Mechanics*, en prensa 2006.
- P. Dardati, L. Godoy, D. Celentano y H. Bertorello. Modelo para la Simulación Numérica de la Solidificación de la Fundición Dúctil. *Mecánica Computacional*, Vol. XXIII, 2653-2677, 2004.
- P. Dardati, Simulación Micromecánica de la Solidificación de la Fundición Dúctil. *Tesis Doctoral*, Universidad Nacional de Córdoba, 2005.
- R. Heine. The Fe-C-Si Solidification Diagram for Cast Irons, *AFS Transactions* 86-71, 391-402, 1986.
- T. Midea y J. Shah. Mold Material Thermophysical Data. *AFS Transactions* 02-080, 1-16, 2002.
- 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), 267-272, 1999.
- J. Sikora, R. Boeri y G. Rivera. 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*, Rumania, 321-329, 2001.
- H. Pang y D. Stefanescu. Stochastic modeling of dendritic and eutectic grain structure evolution during solidification. *Solidification Science and Processing*, 149-156, 1996.
- K. Su, I. Ohnaka, I. Yamauchi y T. Fukusako. Computer Simulation of Solidification of Nodular Cast Iron. *Proceedings of the 3th International Symposium on the Metallurgy of Cast Iron*, Estocolmo, Suecia, 181-189, 1984.