Asociación Argentina

de Mecánica Computacional



Mecánica Computacional Vol XXVI, pp.3512-3529 Sergio A. Elaskar, Elvio A. Pilotta, Germán A. Torres (Eds.) Córdoba, Argentina, Octubre 2007

SIMULACIÓN NUMÉRICA MULTIESCALA DEL PROCESO DE ENFRIAMIENTO DE LA FUNDICIÓN NODULAR

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

 ^aDpto. Mecánica y CIII, Facultad Regional Córdoba, Universidad Tecnológica Nacional, Maestro López esq. Cruz Roja Argentina s/n, Ciudad Universitaria, Córdoba, Argentina, pdardati@industrial.frc.utn.edu.ar, fslack@gmail.com
 ^bDepartamento de Ingeniería Mecánica y Metalúrgica, Pontificia Universidad Católica de Chile Santiago, Chile, dcelentano@ing.puc.cl
 ^cFacultad de Ciencias Exactas, Físicas y Naturales,Universidad Nacional de Córdoba Av. Vélez Sarsfield 1601, Córdoba, Argentina, Igodoy@com.uncor.edu

Palabras clave: fundición nodular, cambio de fase, eutéctico, eutectoide.

Resumen. Las propiedades mecánicas de una fundición dependen de su microestructura, y ésta es, a su vez, el resultado de los cambios de fase que se producen durante el proceso de enfriamiento. En este trabajo se simula numéricamente el comportamiento térmico microestructural de una fundición nodular de composición eutéctica, desde la temperatura de colada hasta la temperatura ambiente, obteniendo como resultado final los porcentajes de ferrita y perlita y la cantidad y distribución de tamaño de los nódulos de grafito. El modelo acopla, mediante el método del "calor latente", la ecuación de conducción del calor, planteada a nivel macroscópico, con la cinética de las transformaciones de fase, analizadas a nivel microscópico. Para la solidificación del material se utiliza un modelo que responde a la teoría plurinodular. Para la transformación en estado sólido se consideran las formaciones de ferrita, mediante una ley de crecimiento basada en la difusión del carbono, y de perlita, mediante la ecuación de Avrami. Se analiza, mediante la resolución de un caso de prueba, la sensibilidad del modelo a la variación de parámetros fundamentales.

1 INTRODUCCIÓN

Se llaman fundiciones a un conjunto de aleaciones a base de hierro, con diversos contenidos de carbono y silicio, que solidifican con un eutéctico.

Durante el proceso de enfriamiento estas aleaciones pueden experimentar transformaciones de fase según un sistema estable, Fe-grafito, o según un sistema llamado metaestable, Fe-Fe3C. En la solidificación para un proceso metaestable, la fase rica en carbono del eutéctico es un carburo de hierro llamado cementita (Fe3C) mientras que para un proceso estable dicha fase es grafito. Las fundiciones pueden clasificarse según el grafito eutéctico sea laminar, nodular o compacto.

Durante su enfriamiento la fundición experimenta un segundo cambio de fase, la transformación eutectoide, en la que la austenita formada en la solidificación, primaria o eutéctica, puede transformarse en ferrita o perlita, dependiendo los porcentajes de cada una de diversos factores. Para composiciones y enfriamientos especiales se pueden obtener otro tipo de matrices tales como austeníticas, martensíticas o bainíticas.

Entre los diversos tipos de fundiciones, la fundición nodular, o también llamada fundición dúctil o de grafito esferoidal, presenta muy buenas propiedades mecánicas y de colabilidad razón por la cual está reemplazando en algunas aplicaciones al acero colado. Desde que se obtuvo por primera vez, muchas han sido las teorías que han intentado explicar el proceso de solidificación de la fundición nodular. Actualmente subsisten dos (Rivera et al., 1999; Sikora et al., 2001): la teoría uninolular y la plurinodular. La diferencia fundamental entre las dos teorías reside en que la teoría uninodular sostiene que los nódulos de grafito nuclean en el líquido y la austenita crece en forma esférica alrededor de ellos. El crecimiento de ambas fases se da por la difusión del carbono a través de la austenita. Por el contrario, la teoría plurinodular propone que tanto la austenita como el grafito nuclean independientemente en el líquido presentando la primera un crecimiento dendrítico de manera tal que en su desarrollo alcanza y rodea a muchos nódulos que quedan incluidos en un mismo grano eutéctico.

Después de la solidificación, a medida que continúa descendiendo la temperatura, la capacidad de la austenita de contener carbono disminuye y el mismo se dirige hacia los nódulos de grafito que continúan creciendo (Guo y Stefanescu, 1997). Cuando la temperatura alcanza el valor correspondiente al equilibrio eutectoide estable, T_{α} , se inicia la transformación de la austenita en ferrita. La ferrita nuclea fundamentalmente en los contornos de las esferas de grafito donde la concentración de carbono de la austenita es menor. La ferrita continúa creciendo formando una envoltura esférica alrededor de los nódulos de grafito, en un proceso gobernado por la difusión del carbono (Aagaard et al., 1996; Guo y Stefanescu, 1997). Cuando la temperatura llega al valor de equilibrio metaestable, T_p , se inicia la nucleación y crecimiento de la fase perlita. La perlita nuclea en los contornos ferrita-austenita y también en los contornos de grano austenita-austenita. Por debajo de la temperatura metaestable la transformación es un proceso competitivo entre la formación de ferrita y la de perlita (Guo y Stefanescu, 1997). La velocidad de crecimiento de la perlita es mayor que la de la ferrita (Aagaard et al., 1996; Guo y Stefanescu, 1997).

Los elementos de aleación pueden favorecer una u otra transformación de manera que según se busque obtener una matriz ferrítica o perlítica (dependiendo de las propiedades mecánicas que se requieran) serán los aleantes elegidos. Los elementos perlitizantes más comunes son el Cr, Mn y Cu (Guo y Stefanescu, 1997).

La velocidad de enfriamiento es otro de los factores que influyen en la microestructura final. Para una composición determinada, un enfriamiento más rápido favorece la formación de perlita mientras que uno más lento aumenta el porcentaje de ferrita (Guo y Stefanescu, 1997). El cambio de fase líquido-sólido tiene influencia en la transformación eutectoide

posterior de diversas maneras. Las micro y macro segregaciones que tienen lugar durante la solidificación generan una heterogeneidad en la composición que puede favorecer una u otra transformación. Además, debido a que la ferrita nuclea fundamentalmente en los contornos del grafito y la austenita puede hacerlo en los contornos de los granos de austenita, el número y tamaño de los nódulos (Aagaard et al., 1996; Guo y Stefanescu, 1997) y el de los granos eutécticos también tienen influencia en el cambio de fase eutectoide (Guo y Stefanescu, 1997).

Dado que las características del grafito y de la matriz metálica determinan las propiedades físicas de la fundición, resulta de gran importancia poder modelar y simular los procesos de enfriamiento de manera de lograr predecir la microestructura final del material. La tarea no resulta sencilla debido a que dicha microestructura depende de la combinación de múltiples aspectos tales como la velocidad de enfriamiento, la composición química y el tratamiento del líquido y, para la transformación eutectoide, se deben considerar además los resultados de la solidificación.

Son muchos los trabajos publicados que presentan modelos de solidificación para la fundición nodular. La mayoría de ellos responden a la teoría unidodular, aún cuando cada vez son más los investigadores que adhieren a la teoría plurinodular. Es posible que esto se deba a que la simulación de la teoría uninodular en la que la unidad de solidificación está constituida por una esfera de grafito con su envoltura de austenita resulta más sencilla.

La transformación eutectoide ha sido simulada como parte de modelos que consideran el proceso de enfriamiento completo desde la temperatura de colada (Aagaard et al., 1996) y, también, de manera aislada a partir de un material ya solidificado que podría ser el caso de un tratamiento térmico en el que la fundición es calentada hasta obtener su austenización y sometida luego a un enfriamiento controlado.

Los trabajos que simulan ambas transformaciones, líquido-sólido y sólido-sólido, usan en todos los casos (según nuestro conocimiento) una solidificación uninodular (Aagaard et al., 1996; Chang et al., 1999; Catalina et al., 2000).

Aagaard et al. (1996) calculan la fracción de perlita como una función del sobreenfriamiento y consideran que cuando la perlita comienza a crecer cesa rápidamente el desarrollo de la fase ferrita. Catalina et al. (2000), analizan el enfriamiento completo de una fundición gris, considerando una ley de nucleación de ferrita en la que la densidad de granos es inversamente proporcional al espaciamiento de las láminas del grafito eutéctico y directamente proporcional a la fracción volumétrica del grafito y del eutéctico. Para el crecimiento de la ferrita, adaptan un modelo utilizado para la fundición nodular basado en la difusión del carbono. Suponen una nucleación instantánea de la perlita, que depende de la fracción de austenita remanente al momento de la nucleación e, inversamente, del espaciamiento promedio de las láminas de grafito. La velocidad de crecimiento de la fase perlita se determina a partir de datos experimentales que dan la variación de la velocidad de crecimiento con la temperatura para diferentes aleaciones ternarias.

En este trabajo se presenta un modelo que permite la simulación del proceso de enfriamiento de una fundición nodular de composición eutéctica desde la temperatura de colada hasta la temperatura ambiente considerando la solidificación equiaxial del material según la teoría plurinodular con un modelo propuesto por Dardati (2005). Se modela también la transformación eutectoide utilizando un modelo de difusión para la fracción de ferrita y la ecuación de Avrami para la de perlita.

En la Sección 2 se presenta el modelo microestructural y en la Sección 3 se analiza la sensibilidad del modelo.

2 MODELO MICROESTRUCTURAL

La simulación del proceso de enfriamiento se lleva a cabo acoplando un modelo macroestructural, que tiene en cuenta la conducción del calor y que se resuelve por el método de los elementos finitos, con modelos que representan la cinética de los cambios de fase eutéctico y eutectoide a nivel microestructural. El acoplamiento se realiza por el método del calor latente (Celentano, 1994).

2.1 Transformación líquido-sólido

Durante la solidificación de una fundición nodular de composición eutéctica según un sistema estable se produce la transformación del líquido a austenita y grafito nodular. El modelo de solidificación que se utiliza en este trabajo (Dardati, 2005; Dardati et al., 2006) responde a la teoría plurinodular.

2.1.1 Leyes de nucleación

Se considera la nucleación independiente del grafito y de la austenita en el líquido según las ecuaciones (1) y (2), respectivamente. La nucleación del grafito se supone continua y cesa con la recalescencia y la de la austenita se considera instantánea y se produce cuando la temperatura alcanza el valor eutéctico T_E :

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

$$N_{\gamma} = A \frac{dT}{dt}$$
(2)

En la ecuación (1), *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 por debajo de la temperatura eutéctica ($T_E - T$). El modelo considera dos zonas de nucleación para el grafito: el líquido interdendrítico (zona 2) y el líquido intergranular (zona 3). En la ecuación (2), N_{γ} es la densidad de granos de austenita y *A* un parámetro que depende del tratamiento del líquido. El número de granos de austenita determina el tamaño de grano final de dicha fase

2.1.2 Crecimiento de los nódulos de grafito

El modelo considera el volumen del grano de austenita dividido en tres zonas (ver Figura 1) 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 (3) y (4) respectivamente:

$$\frac{dR_{gr}}{dt} = \frac{D_c^l \left(C^{l/\gamma'} - C^{l/gr} \right) \rho_l}{R_{gr} \left(C^{gr} \rho_{gr} - C^{l/gr} \rho_l \right)}$$
(3)

$$\frac{dR_{gr}}{dt} = \frac{D_c^l \left(C_{pro} - C^{l/gr} \right) \rho_l}{R_{gr} \left(C^{gr} \rho_{gr} - C^{l/gr} \rho_l \right)}$$
(4)

donde ρ_l y ρ_{gr} son las densidades del líquido y del grafito respectivamente, $D_c^{\ l}$ es el coeficiente de difusión del carbono en el líquido, R_{gr} es el radio del nódulo de grafito y $C^{l/\gamma}$ y $C^{l/gr}$ son las concentraciones de equilibrio de carbono del líquido en contacto con la austenita y del líquido en contacto con el grafito respectivamente.

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.

2.1.3 Crecimiento de la fase austenita

En el cálculo del crecimiento de la fase austenita intervienen la ecuación (5) (Pang y Stefanescu, 1996) que establece el crecimiento de la punta de las dendritas principales, y la ecuación (6), 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. Es decir,

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

donde 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 $C_{\alpha g}$ 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. Además,

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

donde R_n es el radio de la zona 1.

Una explicación detallada del modelo de transformación eutéctica puede verse en Dardati, (2005) y Dardati et al. (2006).



Figura 1: (a) Esquema de solidificación dendrítica equiaxial para la fundición nodular eutéctica. (b) perfil de concentración de carbono.

2.2 Transformación sólido-sólido

Durante la transformación en estado sólido, para velocidades de enfriamiento y composiciones normales, la austenita obtenida durante la solidificación se transforma en ferrita, perlita y grafito. El grafito generado contribuye al aumento de tamaño de los nódulos existentes pero no modifica la cantidad de esferas.

El modelo de transformación eutectoide que se implementa en este trabajo utiliza información del modelo de solidificación: fracción de austenita, fracción de grafito, densidad de nódulos de grafito y distribución de tamaños de nódulos de grafito

2.2.1 Crecimiento de la ferrita

La ferrita nuclea en el contorno de los nódulos de grafito y crece, por difusión del carbono, como una capa esférica alrededor de los mismos, originando los llamados ojos de buey que pueden observarse claramente en las micrografías. Sólo en condiciones muy particulares se observa nucleación y crecimiento de ferrita en los contornos de grano de austenita.

En este trabajo no se simula la nucleación de la ferrita y se considera que la misma crece directamente como una cubierta esférica alrededor de los nódulos (ver Figura 2), a partir de que la temperatura desciende por debajo de la temperatura eutectoide estable T_{α} .



Figura 2: Perfil de concentración de carbono en la capa de ferrita y en la austenita.

La difusión del carbono a través de la capa de ferrita responde a la segunda ley de Fick tal que:

$$D\frac{\partial}{\partial t}\left(r^{2}\frac{\partial C}{\partial r}\right) = \frac{\partial C}{\partial t}$$
(7)

siendo C la concentración del carbono y D su coeficiente de difusión.

Si se considera un proceso cuasi-estacionario, en el que las temperaturas y concentraciones se suponen constantes en cada paso de tiempo, se puede llegar a la siguiente expresión del gradiente de concentración en el límite de la ferrita en contacto con la austenita $r = R_{\alpha}$:

$$\left. \frac{dC}{dr} \right|_{r=R_{\alpha}} = \frac{R_{gr} \left(C^{\alpha/\gamma} - C^{\alpha/gr} \right)}{R_{\alpha} \left(-R_{gr} + R_{\alpha} \right)} \tag{8}$$

donde $C^{\alpha/\gamma}$ y $C^{\alpha/gr}$ son las concentraciones de carbono de equilibrio para la temperatura *T* de la ferrita en contacto con la austenita y con el grafito respectivamente y R_{α} es el radio de la ferrita. Considerando iguales las densidades de la ferrita (ρ_{α}) y de la austenita (ρ_{γ}), se puede expresar el equilibrio de masa en el límite ferrita- austenita como:

$$\frac{d}{dt} \left[\frac{4}{3} \pi R_{\alpha}^{3} \rho_{\alpha} \left(C^{\gamma/\alpha} - C^{\alpha/\gamma} \right) \right] = 4 \pi R_{\alpha}^{2} \rho_{\alpha} D_{\alpha}^{C} \left. \frac{\partial C}{\partial r} \right|_{r=R_{\alpha}}$$
(9)

siendo $D_{\alpha}^{\ C}$ el coeficiente de difusión del carbono en la ferrita y $C^{\gamma/\alpha}$ la concentración de equilibrio de carbono de la austenita en contacto con la ferrita.

Derivando y remplazando el gradiente por la expresión dada en la ecuación (8) se obtiene la velocidad de crecimiento del radio de la ferrita como:

$$\frac{dR_{\alpha}}{dt} = D_{\alpha}^{C} \frac{\left(C^{\alpha/\gamma} - C^{\alpha/gr}\right)}{R_{\alpha} \left(-1 + \frac{R_{\alpha}}{R_{gr}}\right) \left(C^{\gamma/\alpha} - C^{\alpha/\gamma}\right)}$$
(10)

2.2.2 Crecimiento del grafito

Para la obtención de la ecuación para el crecimiento del grafito se sigue un procedimiento igual que el empleado para la ferrita. En este caso, el gradiente de la concentración de carbono en el límite ferrita-grafito queda expresado como:

$$\left. \frac{dC}{dt} \right|_{r=R_{gr}} = \frac{R_{\alpha} \left(C^{\alpha/\gamma} - C^{\alpha/gr} \right)}{R_{gr} \left(-R_{gr} + R_{\alpha} \right)} \tag{11}$$

Planteando equilibrio de masa en el límite grafito-ferrita se obtiene la velocidad de crecimiento del radio del nódulo de grafito que queda expresada como:

$$\frac{dR_{gr}}{dt} = D \frac{\rho_{\alpha}}{\rho_{gr}} \frac{\left(C^{\alpha/\gamma} - C^{\alpha/gr}\right)}{\left(C_{gr} - C^{\alpha/gr}\right)} \frac{1}{R_{gr}\left(1 - \frac{R_{gr}}{R_{\alpha}}\right)}$$
(12)

2.2.3 Crecimiento de la perlita

La cinética de transformaciones isotérmicas en estado sólido, gobernadas por el crecimiento y la nucleación, pueden simularse mediante la ecuación de Johnson-Mehl-Avrami:

$$f = 1 - e^{-k \cdot t^n} \tag{13}$$

en la que f es la fracción de volumen transformada, y k y n son parámetros cinéticos que dependen de la temperatura. La constante k está relacionada con la velocidad de transformación, que involucra tanto la nucleación como el crecimiento, mientras que n determina el tipo de proceso que gobierna la transformación (Gregorutti et al., 2004).

Con el fin de representar un proceso de formación de perlita durante el enfriamiento de una fundición nodular, Chang et al. (1999) expresan la fórmula de Avrami con parámetros dependientes de la temperatura según:

$$f_{p} = 1 - e^{-C(T) \cdot t^{n(T)}}$$
(14)

y determinan experimentalmente la variación de los parámetros C(T) y n(T) con la temperatura. Para una fundición nodular con una composición %C=3.38, %Si=2.532, %Mn=0.174, %P=0.018, %S=0.015, %Mg=0.030, los resultados son los siguientes:

$$C(T) = \exp(-1.49 \times 10^{-3} T^2 + 2.07 T - 730.58)$$
(15)

$$n(T) = 16.27 - 0.017935 T \tag{16}$$

El parámetro C(T) muestra la forma característica de la curva C de un diagrama TTT (tiempo-temperatura-transformación), poniendo de manifiesto una transformación gobernada por la nucleación a altas temperaturas (bajo sobreenfriamiento) y por el crecimiento (por difusión) a bajas temperaturas.

Para la resolución de la ecuación (14), en el modelo computacional implementado en este trabajo, en cada paso de tiempo se calcula un *tiempo ficticio* t_{fic} , a partir de los valores de la fracción de perlita, f_p , y de la temperatura al tiempo t, T^t , según la fórmula (17). Dicho

tiempo ficticio representa el tiempo necesario para producir la fracción de perlita correspondiente al tiempo t en una transformación a temperatura constante T^{t} . La nueva fracción de perlita correspondiente al tiempo real $(t + \Delta t)$ se calcula mediante la ecuación (18).

$$t_{\rm fic}^{\ t} = n \sqrt{\frac{\ln(1 - f_p^{\ t})}{-C(T^{\ t})}}$$
(17)

$$f_p^{t+\Delta t} = 1 - e^{-C(T^t) \cdot \left(t_{fic}^t + \Delta t\right)^n}$$
(18)

En la Figura 3 se esquematiza el procedimiento empleado a través del camino recorrido desde el punto 1 al punto 3. El crecimiento de la fracción de perlita f_p se comienza a calcular a partir de que la temperatura alcanza el valor metaestable T_p .



Figura 3: Representación esquemática de los pasos seguidos para calcular $f_p^{t+\Delta t}$

3 ANÁLISIS DE SENSIBILIDAD DEL MODELO

Se analiza la respuesta del modelo microestructural frente a variaciones de la velocidad de enfriamiento, del parámetro *b* de nucleación del grafito, del coeficiente de difusión del grafito en la ferrita y de la amplitud del intervalo T_{α} - T_{p} . El estudio se concentra en el cambio de fase sólido-sólido. Un análisis detallado de la sensibilidad del modelo del cambio de fase líquido-sólido puede verse en Dardati (2005).

Para facilitar la interpretación de los resultados del análisis de sensibilidad, éste se lleva a cabo a través de la resolución de un caso sencillo de un único elemento unidimensional de dos nodos (Figura 4). En el problema no se simulan el molde ni los elementos de contacto, y la velocidad de enfriamiento viene dada por la extracción de calor constante que se realiza en uno de los nodos del elemento. La dimensión del elemento es lo suficientemente reducida

como para que las curvas de enfriamiento de ambos nodos sean prácticamente coincidentes.

Se toma un caso base con las propiedades del material que se muestran en la Tabla 1, y sobre él se modifican uno a uno los parámetros cuya influencia se analiza. Para este caso base la temperatura inicial es de 1180 °C y el calor extraído es $q = -7 \text{ J/m}^2 \text{ s.}$

Specific heat [kJ/kg °C]			
Temperature [°C]	Value		
20	500		
600	750		
800	750		
1145	820		
1155	840		
1400	840		
Densi dad [kg/m³]: 7000			
Calor Latente [kJ/kg]: 180.000 (solidif.), 20000 (Fer.), 60000 (Per.)			
Coeficientes de difusión Carbono $[m^2/s]$: $D_c^1=5,0 \ 10^{-10}$ and $D_c^{\alpha}=2,2 \ 10^{-10}$			
Parámetros de nucleación graf: b=4,0 10 ¹³ [nuclei/m ³ °C s] and c=340 [°C]			
Parámetro de nucleación austenita [nuclei s/m ³ °C]: A=1,6 10 ⁷			
Coeficiente de Gibbs-Thompson [°K m]: Γ=2,0 10 ⁻⁷			

Tabla 1: Propiedades del material para el caso base.



Figura 4: Elemento unidimensional.

El acoplamiento entre los niveles macro y micromecánico se realiza por medio del método del calor latente. El tratamiento espacial de la ecuación del calor se realiza por el método de los elementos finitos y la resolución temporal se lleva a cabo mediante diferencias finitas (Celentano, 1994).

La Figura 5 muestra las curva de evolución de temperatura y fracciones de líquido, austenita, grafito, ferrita y perlita durante el proceso de enfriamiento para los valores de los parámetros que se muestran en la Tabla 1.



Figura 5: Evolución de temperatura y fracciones de fase para el caso base.

3.1 Variación de la velocidad de enfriamiento

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

En las Figura 6 y Figura 7 se muestran las curvas resultantes al variar la velocidad de extracción del calor del valor utilizado en el caso base a $q = -5 J/m^2 s$ y a $q = -9 J/m^2 s$ respectivamente.





En la Figura 8 se pueden ver las curvas de evolución de las fracciones de ferrita y de perlita para los tres valores de velocidad de enfriamiento. Se observa claramente que el comportamiento del modelo se corresponde con las variaciones ya comentadas



Figura 8: Evolución de las fracciones de ferrita y perlita para distintos valores de q.

3.2 Variación de la densidad de nódulos de grafito

Los ensayos experimentales demuestran que la fase ferrita nuclea principalmente en los contornos de los nódulos de grafito y se desarrolla como una capa esférica alrededor de los mismos. Esto produce como consecuencia que cuanto mayor sea el número de nódulos mayor será la posibilidad de nucleación y la velocidad de crecimiento de la fracción de ferrita.

En el modelo implementado la modificación del parámetro b de la ecuación (1) introduce cambios en la cantidad de nódulos de grafito que se producen en la solidificación, a mayor valor de b mayor densidad de nódulos (Boeri, 1986; Dardati, 2005). En el caso analizado las densidades obtenidas para cada valor de b pueden verse en la Tabla 2.

En las Figura 9 y Figura 10 se muestran la temperatura y las fracciones de las distintas fases para b1 = 2.0E13 y b3= 6.0E13 respectivamente. En la Figura 11 pueden verse los cambios que experimentan las fracciones de ferrita y las fracciones de perlita. Se observa claramente que el modelo sigue la misma tendencia observada en los ensayos experimentales.

Parámetro b [Nucl./m ³ °C s]	N° de nod/ m^3
B1 = 2.0E13	0.132E13
B2 = 4.0E13	0.144E13
B3 = 6.0E13	0.152E13

Tabla 2: Densidades de nódulos para los distintos valores del parámetro b.



Figura 10: Evolución de temperatura y fracciones para un b=6.0E13.



Figura 11: Evolución de las fracciones de ferrita y perlita con distintos valores de *b. b1=2.E13, b2=4.E13*, *b3=6.E13*.

3.3 Variación de la temperatura de equilibrio estable

Además de la variación de la velocidad de enfriamiento, otra forma de reducir el tiempo disponible para el desarrollo de la fracción ferrita sin la competencia del crecimiento de la perlita, es la disminución de la diferencia entre la temperatura de equilibrio estable y la temperatura de equilibrio metaestable (para una velocidad de enfriamiento constante). En la Figura 12 se muestra la evolución de las distintas fracciones para una temperatura estable T_{α} = 780 °C. En la Figura 12 puede verse cómo cuando disminuye el intervalo de temperatura disminuye la fracción de ferrita y aumenta la de perlita.



Figura 12: Evolución de temperatura y fracciones para una T_{α} =780°C.



Figura 13: Variación de las fracciones de ferrita y perlita para distintos valores de T_{α}

3.4 Variación del coeficiente de difusión del carbono en la ferrita D_{α}^{C}

Algunos elementos aleantes pueden influir sobre la velocidad de difusión del carbono en la ferrita y, dado que el proceso de crecimiento de la fase ferrita es de carácter difusivo, tienen influencia en la velocidad de formación de esta fase y por lo tanto en su la fracción final.

En la Figura 14 se muestra la evolución de las fracciones y la temperatura para un $D_{\alpha}^{\ C} = 2.2\text{E}-10 \text{ m}^2/\text{s}$ y en la Figura 15 para un $D_{\alpha}^{\ C} = 2.4\text{E}-10 \text{ m}^2/\text{s}$

Se puede observar en la Figura 16 que a mayores valores del coeficiente de difusión mayor fracción de ferrita.



Figura 14: Evolución de temperatura y fracciones para $D_{\alpha}^{\ C} = 2.0 \text{ E-10 m}^2/\text{s}.$



Figura 15: Evolución de temperatura y fracciones para $D_{\alpha}^{\ C} = 2.4\text{E-}10 \text{ m}^2/\text{s}.$



Figura 16: Variación de las fracciones de ferrita y perlita para distintos valores de $D_{\alpha}^{\ C}$. D1=2.0 E-10 m²/s , D2=2.2 E-10 m²/s, D3=2.4 E-10 m²/s.

4 CONCLUSIONES

Se ha implementado un modelo capaz de representar la evolución de la temperatura y de las fracciones de fase de una fundición nodular durante el proceso de enfriamiento que se desarrolla desde la temperatura de colada hasta la temperatura ambiente. Para esto se acoplaron un modelo de tratamiento de la ecuación de la energía a nivel macroscópico con dos modelos microscópicos de cambio de fase, uno para la solidificación y otro para la transformación en estado sólido. En un proceso de cálculo continuo, los resultados del modelo de transformación eutéctica (es decir, porcentaje de austenita, porcentaje de grafito, densidad y distribución de tamaño de nódulos de grafito), se tienen en cuenta para la siguiente transformación eutectoide. El modelo representa satisfactoriamente las variaciones globales de la fracción de perlita y ferrita, las que pueden observarse experimentalmente, frente a la modificación de algunos parámetros fundamentales de la transformación. Sin embargo, resta como trabajo futuro la validación del modelo mediante comparación de los resultados numéricos con los experimentales.

REFERENCIAS

- R. Aagaard, J. Hattel, W. Schäfer, I.Svensson y P. Hansen. Simulation vs. Reality of an Industrial Ductile Iron Casting. *AFS Transactions* 96-185, 659-667, 1996.
- R. Boeri. The Solidification of Ductile Cast Iron. *Doctoral Thesis*, University of British Columbia, Canadá, 1989.
- A. Catalina, X. Guo, D. Stefanescu, L. Chuzhoy y M. Pershing. Prediction of Room Temperatura Microstructure and Mechanical Properties in Gray Iron Casting, *AFS Transactions* 00-72, 247-457, 2000.
- D. Celentano, E. Oñate y S. Oller. A Temperature-Based Formulation for Finite Element Analysis of Generalized Phase-Change Problems. *International Journal for Numerical Methods in Engineering* 37, 3441-3465, 1994.
- S. Chang, D. Shangguan y D. Stefanescu. Prediction of Microstructural Evolution in SG Cast Iron from Solidification to Room Temperature, *AFS Transactions* 91-99, 531-541, 1999.
- P. Dardati, Simulacion Micromecánica de la Solidificación de la Fundición Dúctil. *Tesis Doctoral*, Universidad Nacional de Córdoba, 2005.
- P. Dardati, L. Godoy y D. Celentano. Microstructural simulation of solidification process of spheroidal-graphite cast iron. *Journal of Applied Mechanics*, Vol. 73, n° 6, 977-983, 2006.
- R. Gregorutti, K. Laneri, J. Desimoni y R. Mercader. Study of the Austempering Transformation Kinetics in Compacted Graphite Cast Irons, *Metallurgical and Materials Transactions A*, Vol. 35A, 103-110, 2004.
- X. Guo y D. Stefanescu. Solid Phase Transformation in Ductile Iron- A Benchmark for Computational Simulation of Microstructure, *AFS Transactions* 97-81, 533-543, 1997.
- H. Pang y D. Stefanescu. Stochastic modeling of dendritic and eutectic grain structure evolution during solidification. *Solidification Science and Processing*, 149-156, 1996.
- 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.