



CONSIDERACIÓN DE EFECTOS MICROESTRUCTURALES EN LA MODELIZACIÓN TERMOMECAÁNICA DE LA SOLIDIFICACIÓN Y ENFRIAMIENTO DE LA FUNDICIÓN DE HIERRO

Diego Celentano

Centro Internacional de Métodos Numéricos en Ingeniería (CIMNE)
E.T.S. de Ingenieros de Caminos, Canales y Puertos
Universidad Politécnica de Cataluña
Gran Capitán s/n, Módulo C1, 08034 Barcelona, España

RESUMEN

En este trabajo se presenta un modelo termomecánico que incluye efectos microestructurales con la finalidad de simular problemas de solidificación y enfriamiento de la fundición de hierro con grafito esferoidal. El cambio de fase líquido-sólido se tiene en cuenta por medio de una relación fracción líquida-temperatura explícita mientras que el cambio de fase sólido-sólido se describe con un modelo de nucleación y crecimiento regido por una ecuación basada en la ley de Avrami-Johnson-Mehl. Dentro del contexto de la termoviscoplasticidad, se describe el comportamiento promedio de las fases existentes en el material. Por último, se valida el modelo comparando resultados numéricos con mediciones experimentales.

ABSTRACT

A thermomechanical model including microstructural effects to simulate the solidification and cooling of SG cast iron problems is presented. In particular, the liquid-solid phase-change is taken into account using an explicit liquid fraction-temperature relationship while the solid-solid phase-change is described through a nucleation and growth model governed by an evolution equation based on the Avrami-Johnson-Mehl law. Moreover, the average behaviour of the different phases existing in the material is described within the context of the thermoviscoplasticity theory. Finally, the model is validated comparing numerical results with experimental measurements.

1. INTRODUCCIÓN

La simulación numérica del proceso de solidificación y enfriamiento de la fundición de hierro ha originado en los últimos años la formulación de una gran variedad de modelos en el contexto de la termodinámica. Si bien muchos de ellos tienen un enfoque termomecánico general del problema (ver [1-3] y referencias allí mencionadas), sólo recientemente se han desarrollado modelos que, además, incluyen efectos microestructurales [4,5]. La consideración de tales efectos dentro de un marco fenomenológico no es sencilla debido, fundamentalmente, a la naturaleza bien diferenciada de los fenómenos macro y microscópicos. Sin embargo, una opción posible es la extrapolación de los mecanismos relacionados con la microestructura al nivel macroscópico. De esta forma, se puede tener en cuenta la influencia de dichos fenómenos en determinadas variables macroscópicas.

Dentro del marco mencionado, en este trabajo se presenta un modelo termomecánico con inclusión de efectos microestructurales para simular problemas de solidificación y enfriamiento de la fundición de hierro con grafito esferoidal. El modelo incorpora las expansiones volumétricas producidas en las transformaciones metalúrgicas que sufre el material [4,5]. En particular, la transformación líquido-sólido se representa mediante una

relación fracción líquida-temperatura de tipo explícita mientras que el cambio de fase sólido-sólido (transformación eutécticoide austenita (γ)-ferrita (α)) se tiene en cuenta por medio de un modelo de nucleación y crecimiento regido por una ecuación de evolución de la fase ferrita basada en la ley de Avrami-Johnson-Mehl [4,5].

El comportamiento termomecánico de las diferentes fases macroscópicas que se desarrollan durante el proceso se obtiene a partir de la definición de la energía libre del material en el contexto de la teoría de la termoviscoplasticidad [7,9]. Dicha definición considera un comportamiento promedio de algunas de las fases y supone válida la teoría de mezclas para la descripción de la fase austenita-ferrita [4]. A partir de estas consideraciones, es posible derivar las relaciones constitutivas y la expresión de la disipación [4,5].

Es importante mencionar que el comportamiento del material del molde (la arena verde es uno de los materiales más usados en la industria de la fundición) se lo simula mediante un modelo constitutivo ya existente [3,6] y el mismo no será descrito en este trabajo.

Por último, se analiza un problema de solidificación de fundición con grafito esférico [5,6] y se comparan los resultados del presente modelo con algunas mediciones experimentales.

2. FORMULACIÓN TERMOMECAÁNICA

Sean $\Omega_{(i)} \subset \mathbb{R}^{n_{dim}}$ ($1 \leq n_{dim} \leq 3$ y $i = 1, \dots, n_{body}$) las configuraciones de referencia de diversos n_{body} cuerpos continuos $B_{(i)}$ con coordenadas materiales designadas como X , $\Gamma_{(i)} = \partial\Omega_{(i)}$ sus respectivos contornos y $T \subset \mathbb{R}^+$ el intervalo de tiempo de análisis (para simplificar la notación, el subíndice (i) no será considerado en las ecuaciones que siguen). Se supone, además, válida la hipótesis de desplazamientos/deformaciones infinitesimales. Teniendo en cuenta estas definiciones, la descripción de algunos procesos termomecánicos puede realizarse a través de la siguiente forma local de las ecuaciones de campo [1-3]:

- balance de la cantidad de movimiento,

$$\nabla \cdot \sigma + \rho_o B_F = \rho_o \ddot{u} \quad \text{en } \Omega \times T, \quad (2.1)$$

- balance de la energía,

$$\rho_o \dot{\omega} = -\nabla \cdot q + \rho_o r + \sigma : \dot{\epsilon} \quad \text{en } \Omega \times T, \quad (2.2)$$

junto con condiciones de contorno adecuadas para el campo de desplazamientos u , el tensor de tensiones σ , la temperatura T y el vector de flujo de calor q , condiciones iniciales para u , el campo de velocidades \dot{u} y T y relaciones constitutivas apropiadas para la energía interna específica ω , σ y q [1,3]. En estas ecuaciones, $\nabla = \partial/\partial X$ es el operador gradiente, ρ_o es la densidad en la configuración de referencia, B_F es la fuerza de volumen, r es la fuente de calor específica, ϵ es el tensor de deformaciones infinitesimal y el punto superpuesto sobre las variables indica derivada temporal.

Teniendo en cuenta la desigualdad de Clausius-Duhem y la definición de la energía libre específica de Helmholtz $\psi = \psi(\epsilon, \alpha_k, T) = \omega - \eta T$, donde η es la entropía interna específica, es posible establecer las relaciones constitutivas para ω y σ : $\omega = \psi - \frac{\partial \psi}{\partial T} T$ y $\sigma = \rho_o \frac{\partial \psi}{\partial \epsilon}$ [7,8]. En la definición de ψ , α_k representa el conjunto de n_{int} ($k = 1, \dots, n_{int}$; $n_{int} \geq 1$) variables internas fenomenológicas regidas por ecuaciones de evolución con valores iniciales α_{k_0} [7,8]. Nótese además que en esta definición de ψ se ha supuesto que $\epsilon(X, t)$, $\alpha_k(X, t)$ y $T(X, t)$ son las variables de estado del problema [1-6].

3. MODELO CONSTITUTIVO DE LA FUNDICIÓN DE HIERRO

a) Variables internas

En una fundición de hierro hipereutéctica es posible encontrar las siguientes fases macroscópicas [4,5]: 1) fase líquida, 2) fase pastosa formada por líquido y grafito, 3) fase sólida ($\gamma + C_g$) de austenita y grafito, 4) fase sólida ($\gamma + \alpha + C_g$) de austenita, ferrita y grafito y 5) fase sólida ($\alpha + C_g$) de ferrita y grafito. El objetivo del presente modelo constitutivo es la descripción del comportamiento del material en las cinco fases mencionadas considerando una única formulación. En particular, el modelo tiene en cuenta un comportamiento promedio del material para las fases 1, 2, 3 y 5 [6] mientras que la fase 4 se describe por medio de la teoría de mezclas aplicada a los componentes austenita + grafito y ferrita + grafito [4,5]. Una vez más, se supone un comportamiento promedio del material para cada uno de tales componentes los cuales, de aquí en lo que sigue, se indicarán con los símbolos γ y α respectivamente. Estas suposiciones se reflejarán claramente en la definición de la energía libre que se dará más adelante.

De acuerdo con [1-5], se adoptan las siguientes variables internas: ($\alpha_1 = \epsilon^{vp}$, $\alpha_2 = p^{vp}$, $\alpha_3 = f_{pc}^{\gamma\alpha}$, $\alpha_4 = \eta^{vp}$), donde ϵ^{vp} es el tensor de deformación viscoplástica [4-7], p^{vp} es la variable interna relacionada con el endurecimiento isótropo [4-7], $f_{pc}^{\gamma\alpha}$ es la fracción de volumen de la fase γ [4,5] y η^{vp} expresa la parte no reversible de la entropía [1-3]. Tal como se mostrará más adelante, también será necesario definir variables microscópicas para la evaluación de $f_{pc}^{\gamma\alpha}$.

b) Función de energía libre propuesta

Restringiendo la formulación del modelo al comportamiento termoelastoviscoplastico isótropo, la energía libre ψ se formula como [1-3,5]:

$$\psi = \hat{\psi}(\epsilon, \epsilon^{vp}, p^{vp}, f_{pc}^{\gamma\alpha}, \eta^{vp}, T) = \hat{\psi}_{te}(\epsilon - \epsilon^{vp}, f_{pc}^{\gamma\alpha}, T) + \hat{\psi}_{tp}(p^{vp}, f_{pc}^{\gamma\alpha}, \eta^{vp}, T) + \hat{\psi}_{pc}(f_{pc}^{\gamma\alpha}, T), \quad (3.1)$$

donde ψ_{te} , ψ_{tp} y ψ_{pc} son las partes termoelástica, termoviscoplastica y de cambio de fase, respectivamente, de la función ψ . Debe notarse que la ecuación (3.1) constituye una forma parcialmente desacoplada de definir ψ [1-3].

La parte termoelástica ψ_{te} se define como [1-6]:

$$\psi_{te} = \psi_{te-cl} + \psi_{te-tr}, \quad (3.2)$$

siendo ψ_{te-cl} la parte termoelástica "clásica" [1-3] y $\psi_{te-tr}|\alpha$ la parte termoelástica debida a la transformación $\gamma \rightarrow \alpha$. El término ψ_{te-cl} es [4,5]:

$$\psi_{te-cl} = f_{pc}^{\gamma\alpha} \psi_{te-cl}|\gamma + (1 - f_{pc}^{\gamma\alpha}) \psi_{te-cl}|\alpha, \quad (3.3)$$

donde la parte termoelástica clásica $\psi_{te-cl}|\alpha$ ($ph = \gamma, \alpha$) se escribe como [1-3,5]:

$$\begin{aligned} \psi_{te-cl}|\alpha = & \frac{1}{2\rho_o} (\epsilon - \epsilon^{vp}) : \mathbb{C}(T)|_{ph} : (\epsilon - \epsilon^{vp}) - \frac{1}{\rho_o} \mathbb{C}(T)|_{ph} : [\alpha_{th}^e(T, T_{ref})]_{ph} (T - T_{ref}) - \\ & - \alpha_{th}^e(T_o, T_{ref})|_{ph} (T_o - T_{ref}) : (\epsilon - \epsilon^{vp}) + c^e(T, T_{ref})|_{ph} (T - T_{ref}) - c^e(T_o, T_{ref})|_{ph} (T_o - T_{ref}) + \\ & + c^e(T, T_{ref})|_{ph} T \ln \frac{T}{T_{ref}} + c^e(T_o, T_{ref})|_{ph} T_o \ln \frac{T_o}{T_{ref}} + \psi_o|\alpha - \eta_o (T - T_o) + \frac{1}{\rho_o} \sigma_o : (\epsilon - \epsilon^{vp}), \end{aligned} \quad (3.4)$$

tal que $\mathbb{C}(T)|_{ph}$ es el tensor constitutivo elástico, $\alpha_{th}^e|_{ph}$ es el tensor de dilatación térmica secante, T_{ref} es una temperatura de referencia, el subíndice o indica el estado inicial de las

diferentes variables y el superíndice s se refiere a las propiedades termomecánicas secantes [1-3]. La parte termoelástica debida a la transformación $\gamma \rightarrow \alpha$ ψ_{te-tr} es [4,5]:

$$\psi_{te-tr} = (1 - f_{pc}^{\gamma\alpha}) \frac{\delta_{\gamma\alpha}}{\rho_0} \mathbf{1} : \mathbb{C}(T)|_{\alpha} : (\epsilon - \epsilon^{vp}), \quad (3.5)$$

donde $\mathbf{1}$ es el tensor unidad y $\delta_{\gamma\alpha}$ indica la variación relativa de volumen que se produce en la transformación $\gamma \rightarrow \alpha$ [4].

De manera análoga a la ecuación (3.3), la parte termoviscoplastica ψ_{tp} se define como [4,5]:

$$\psi_{tp} = f_{pc}^{\gamma\alpha} \psi_{tp}|_{\gamma} + (1 - f_{pc}^{\gamma\alpha}) \psi_{tp}|_{\alpha}, \quad (3.6)$$

siendo $\psi_{tp}|_{ph}$ ($ph = \gamma, \alpha$) [4,5]:

$$\psi_{tp}|_{ph} = a_v|_{ph} (p^{vp} + \frac{1}{b_v|_{ph}} e^{-b_v|_{ph} p^{vp}}) - T \eta^{vp}, \quad (3.7)$$

donde a_v y b_v son parámetros de cada una de las fases del material relacionados con el efecto de endurecimiento isótropo [4].

La parte de cambio de fase ψ_{pc} se define de la siguiente manera [6]:

$$\psi_{pc} = \psi_{pc}^{ls} + \psi_{pc}^{\gamma\alpha}, \quad (3.8)$$

siendo ψ_{pc}^{ls} y $\psi_{pc}^{\gamma\alpha}$ los términos correspondientes a los cambios de fase líquido-sólido y sólido-sólido respectivamente [1-3,5]:

$$\psi_{pc}^{ls} = \hat{\psi}_{pc}^{ls}(T) = - \int_{T_{ref}}^T A_{pc}^{ls} d\theta, \quad (3.9)$$

donde A_{pc}^{ls} se define como:

$$A_{pc}^{ls} = \hat{A}_{pc}^{ls}(T) = \int_{T_{ref}}^T \frac{L_{ls}^s}{\theta} \frac{\partial f_{pc}^{ls}}{\partial \theta} d\theta + \int_{T_{ref}}^T \frac{\partial L_{ls}^s}{\partial \theta} \frac{[f_{pc}^{ls} - f_{pc}^{ls}(T_{ref})]}{\theta} d\theta, \quad (3.10)$$

y

$$\psi_{pc}^{\gamma\alpha} = \hat{\psi}_{pc}^{\gamma\alpha}(f_{pc}^{\gamma\alpha}) = \int_{f_{pc}^{\gamma\alpha}|_{ref}}^{f_{pc}^{\gamma\alpha}} L_{\gamma\alpha}^s d\theta + \int_{f_{pc}^{\gamma\alpha}|_{ref}}^{f_{pc}^{\gamma\alpha}} \frac{\partial L_{\gamma\alpha}^s}{\partial \theta} [f_{pc}^{\gamma\alpha} - f_{pc}^{\gamma\alpha}|_{ref}] d\theta, \quad (3.11)$$

tal que $L_{ls}^s = \hat{L}_{ls}^s(T)$ y $L_{\gamma\alpha}^s = \hat{L}_{\gamma\alpha}^s(f_{pc}^{\gamma\alpha})$ son los calores latentes específicos secantes asociados a las funciones de cambio de fase líquido-sólido $f_{pc}^{ls} = f_{pc}^{ls}(T)$ y sólido-sólido $f_{pc}^{\gamma\alpha}$, respectivamente [1-3,5,6]. Nótese que en estas definiciones ya se ha supuesto que el cambio de fase líquido-sólido sólo depende de T mientras que el sólido-sólido es únicamente función de la variable interna $f_{pc}^{\gamma\alpha}$ que se define a partir de un modelo microestructural. Las expresiones correspondientes a dichas funciones de cambio de fase se darán más adelante.

Es importante también destacar que el conjunto de ecuaciones (3.1)-(3.11) describen el comportamiento de las cinco fases mencionadas anteriormente: las fases 1 y 3 se rigen por los términos $\psi_{te}|_{\gamma}$ y $\psi_{tp}|_{\gamma}$, la fase 2 por los términos $\psi_{te}|_{\gamma}$, $\psi_{tp}|_{\gamma}$ y ψ_{pc}^{ls} , la fase 4 por la suma ponderada en $f_{pc}^{\gamma\alpha}$ de los términos $\psi_{te}|_{\gamma}$, $\psi_{tp}|_{\gamma}$, $\psi_{te}|_{\alpha}$ y $\psi_{tp}|_{\alpha}$ y $\psi_{pc}^{\gamma\alpha}$ y, por último, la fase 5 se rige por los términos $\psi_{te}|_{\alpha}$ y $\psi_{tp}|_{\alpha}$.

La expresión del tensor constitutivo \mathbb{C} adoptada en este trabajo es la propuesta en [1, 3] que consiste, básicamente, en considerar la parte desviadora de \mathbb{C} ponderada por la fracción de

volumen líquida f_{pc}^{li} del material que está solidificando. De esta forma es posible representar tanto la ley constitutiva convencional de un líquido en reposo como la correspondiente a un material en estado sólido [1-3,5,6].

La definición de ψ dada por las ecuaciones (3.1)-(3.11) constituye un punto crucial del modelo, ya que a partir de la misma es posible derivar las relaciones constitutivas secante tangente para ω y σ [1-3,5,6]. En este contexto, además, la Ley de Fourier se reescribe teniendo en cuenta el comportamiento de las diferentes fases (ver [4] para más detalles). Además, esta definición de ψ permite obtener las variables conjugadas de las variables internas del modelo, es decir, $-\sigma$, C^{vp} , $Z^{\gamma\alpha}$ y T son las variables conjugadas de ϵ^{vp} , p^{vp} , $f_{pc}^{\gamma\alpha}$ y η^{vp} , respectivamente, donde C^{vp} es la función de endurecimiento viscoplastico [1-5] y $Z^{\gamma\alpha}$ es la "tasa de restitución de energía de transformación de fase" [4,5]. Por último, con estas consideraciones es posible obtener de forma inmediata la expresión de la disipación viscoplastica [5-9].

c) Ecuaciones de evolución

Dentro del contexto de la viscoplasticidad [7,9], el comportamiento termoviscoplastico de un cuerpo está regido por una función de estado, denominada función de fluencia $F(\mathbf{q}_k) : \mathbb{R}^{n_{int}} \rightarrow \mathbb{R}$ ($\mathbf{q}_k = -\partial\psi/\partial\alpha_k$ son las variables conjugadas de α_k), tal que no se produce evolución de las variables viscoplasticas cuando $F < 0$. Es decir, esta última condición define el dominio termoelástico admisible, mientras que en el dominio termoviscoplastico se debe cumplir $F \geq 0$. En general, la evolución de las variables internas viene dada por la siguiente relación [7,9]:

$$\dot{\alpha}_k = -\frac{\partial\Phi}{\partial\mathbf{q}_k}, \quad (3.12)$$

donde $\Phi = \hat{\Phi}(F)$ es el potencial viscoplastico tal que $\Phi = 0$ si $F \leq 0$ [7,9].

Una posible generalización de este modelo consiste en suponer que existe un comportamiento "combinado" del material [1,5,7-9], es decir, que del conjunto de variables internas α_k existe un subconjunto de ellas tal que su ley de evolución no dependa de ninguna función de fluencia, es decir, el potencial viscoplastico "generalizado" es $\Phi = \hat{\Phi}(\alpha_k, \mathbf{q}_k, F)$.

d) Potencial viscoplastico

Se define el siguiente potencial viscoplastico generalizado [4,5]:

$$\hat{\Phi} = \hat{\Phi}(\epsilon^{vp}, f_{pc}^{\gamma\alpha}, \sigma, C^{vp}, Z^{\gamma\alpha}, T) = \hat{\Phi}_{tp}(f_{pc}^{\gamma\alpha}, \sigma, C^{vp}, T) + \hat{\Phi}_{pc}(f_{pc}^{\gamma\alpha}, Z^{\gamma\alpha}, T), \quad (3.13)$$

donde $\hat{\Phi}_{tp}$ y $\hat{\Phi}_{pc}$ son, respectivamente, las partes termoviscoplastica y de cambio de fase de $\hat{\Phi}$.

La parte termoviscoplastica $\hat{\Phi}_{tp}$ es [4,5]:

$$\hat{\Phi}_{tp} = \hat{\Phi}_{tp-cl} + \hat{\Phi}_{tp-tr}, \quad (3.14)$$

donde $\hat{\Phi}_{tp-cl}$ es el término termoviscoplastico "clásico" y $\hat{\Phi}_{tp-tr}$ es el potencial viscoplastico de transformación de fase. Una vez más, de manera análoga a las ecuaciones (3.3) y (3.6), el término $\hat{\Phi}_{tp-cl}$ se escribe como [4,5]:

$$\hat{\Phi}_{tp-cl} = f_{pc}^{\gamma\alpha} \hat{\Phi}_{tp-cl}|\gamma + (1 - f_{pc}^{\gamma\alpha}) \hat{\Phi}_{tp-cl}|\alpha, \quad (3.15)$$

siendo

$$\hat{\Phi}_{tp-cl}|\rho h = \frac{\langle F|_{\rho h} \rangle^{1+n_w|\rho h}}{(K_w|\rho h)^{n_w|\rho h} (1+n_w|\rho h)}, \quad (3.16)$$

donde $K_w(T)$ es la viscosidad, $n_w(T)$ es un parámetro del material [4] y $\langle \cdot \rangle$ es el símbolo de Macauley [7-9]. Tal como se aprecia en la ecuación (3.16), el comportamiento de las fases

γ y α se rigen por funciones de finencia diferentes. En este modelo, se considera que tanto $F|_{\gamma} = \hat{F}|_{\gamma}(\sigma, C^{vp}, T)$ como $F|_{\alpha} = \hat{F}|_{\alpha}(\sigma, C^{vp}, T)$ son las funciones de Von Mises con funciones de endurecimiento térmico diferentes para cada una de dichas fases [1-5]. El término Φ_{lp-tr} es [4,5]:

$$\Phi_{lp-tr} = f_v h_v, \quad (3.17)$$

siendo $f_v = \hat{f}_v(\sigma)$ y $h_v = \hat{h}_v(f_{pc}^{\gamma\alpha}, T)$ funciones a determinar experimentalmente [4].

La parte de cambio de fase Φ_{pc} es:

$$\Phi_{pc} = -Z^{\gamma\alpha} g_v, \quad (3.18)$$

donde $g_v = \hat{g}_v(f_{pc}^{\gamma\alpha}, T)$ es una función que también debe ser obtenida experimentalmente [4].

Con la definición dada del potencial viscoplástico es posible, por medio de la ecuación (3.12), obtener las ecuaciones de evolución para las variables internas del modelo [4,5].

e) Modelo del cambio de fase líquido-sólido

Se adopta la siguiente definición de f_{pc}^{ls} para representar el cambio de fase líquido-sólido [1-3,6]:

$$f_{pc}^{ls}(T) = \begin{cases} 0 & ; \forall T \leq \bar{T}_s \\ 0 < g(T) \leq 1 & ; \bar{T}_s < \forall T \leq \bar{T}_l \\ 1 & ; \forall T > \bar{T}_l \end{cases} \quad (3.19)$$

donde \bar{T}_s y \bar{T}_l indican las temperaturas "solidus" y "liquidus", respectivamente, tal que la función $g(T)$ expresa la forma de liberación o absorción del calor latente. Claramente, esta última definición corresponde al caso de cambio de fase no isotérmico [1-3]. La función $g(T)$ en la ecuación (3.19) puede obtenerse usando un micromodelo [4]. En este trabajo, sin embargo, se considera un punto de vista macroscópico a través de una función biyectiva explícita $g - T$ concavida [3,5]. La elección más simple es la lineal, es decir, $g = (T - \bar{T}_s)/(\bar{T}_l - \bar{T}_s)$.

f) Modelo microestructural del cambio de fase sólido-sólido

Tal como fue comentado anteriormente, la evolución de $f_{pc}^{\gamma\alpha}$ se obtiene por medio de las ecuaciones (3.12) y (3.18) una vez establecida la función g_v . Basándose en la ley de Avrami-Johnson-Mehl [4], se propone una función g_v tal que resulte la siguiente definición de $f_{pc}^{\gamma\alpha}$:

$$f_{pc}^{\gamma\alpha} = 1 - \{1 - e^{[A(T, t_n) - A(T_d, t_n)]}\} H(\xi - 1), \quad (3.20)$$

donde H es la función de Heaviside, ξ es la "fracción de nucleación" [4] y A es una función dada por:

$$A(T, t_n) = -K_{c1} e^{-(K_{c2}/T)} t_n^{n_c}, \quad (3.21)$$

tal que la ecuación de evolución de ξ es:

$$\dot{\xi} = \frac{(T_{ss} - T)^2}{K_{c0} T}. \quad (3.22)$$

En la ecuación (3.22), K_{c0} es una constante del material y T_{ss} es la temperatura de comienzo de la nucleación. Por otro lado, en la ecuación de crecimiento (3.20), T_d es la temperatura de finalización de la nucleación ($\xi = 1$), K_{c1} , K_{c2} y n_c son parámetros del material y t_n es el tiempo de duración de la nucleación (tiempo transcurrido desde $\xi = 0$ con $T = T_{ss}$ hasta $\xi = 1$).

De acuerdo con la ecuación (3.20), se ve claramente que durante la nucleación $f_{pc}^{\gamma\alpha}$ no evoluciona. Una vez finalizada la nucleación, $f_{pc}^{\gamma\alpha}$ comienza a crecer partiendo de un valor

nulo gracias a la consideración de la función $A(T_2, t_n)$ en el exponente de la ecuación (3.20). En este último aspecto se diferencia el presente modelo de cambio de fase sólido-sólido con el presentado en [4].

4. EJEMPLO NUMÉRICO

Se realiza un análisis termomecánico de un espécimen cilíndrico de hierro con grafito esferoidal (diámetro=70 mm y altura=140 mm) que se halla en un molde de arena rodeado, a su vez, de una cáscara de acero (diámetro interior=185 mm y espesor=30 mm) que tiene la finalidad de evitar la deformación exterior de la arena. La Figura 1 muestra el esquema y disposición general del experimento. Se ha medido la evolución de la temperatura y del desplazamiento radial en puntos situados aproximadamente en la mitad de la altura del espécimen. Para tal fin, se ubican termopares en las direcciones radiales 0°, 120° y 240°, comenzando desde el eje del cilindro hasta posiciones dentro de la arena del molde.

Las propiedades termomecánicas de los materiales que intervienen en este problema pueden consultarse en [6]. En el análisis numérico se suponen válidas las condiciones de axi-simetría y se realizan los cálculos en una malla compuesta 540 elementos finitos isoparamétricos de 4 nodos. La temperatura inicial uniforme de la pieza es de 1250 °C mientras que la de los moldes es de 25 °C.

Por razones de espacio, los resultados que se muestran a continuación se refieren al balance energético del problema considerando en forma acoplada el modelo microestructural presentado anteriormente.

La Figura 2 muestra los resultados experimentales de la evolución de la temperatura en diferentes puntos [6]. En la Figura 3 se presentan dichas evoluciones considerando un modelo para el cambio de fase sólido-sólido como el expresado por la ecuación (3.19), es decir, sin consideraciones microestructurales. Por otro lado, la Figura 4 muestra los mismos resultados teniendo en cuenta el modelo microestructural presentado anteriormente. Mientras que en la primera de las simulaciones la temperatura de finalización del cambio de fase sólido-sólido es un dato conocido del problema, en el segundo análisis dicha temperatura viene determinada por el modelo microestructural y no puede conocerse *a priori*. Además, la velocidad de liberación del calor latente es totalmente diferente en ambos casos hecho que produce algunas variaciones en la evolución de las temperaturas. Por último, es posible observar un buen ajuste entre los resultados experimentales y los calculados.

CONCLUSIONES

Se ha presentado en este trabajo un modelo termomecánico considerando efectos microestructurales para simular problemas de solidificación de fundiciones de hierro con grafito esferoidal. Este modelo se halla formulado dentro del contexto termomecánico desarrollado en [1, 3], es una extensión del modelo viscoplastico descrito en [4, 5] y la finalidad del mismo es la descripción del comportamiento promedio de las fases existentes en el material. El cambio de fase líquido-sólido ha sido tenido en cuenta por medio de una relación fracción líquida-temperatura explícita mientras que la transformación sólido-sólido (austenita a ferrita) se la describe con un modelo de nucleación y crecimiento de la fase ferrita regido por una ecuación basada en la ley de Avrami-Johnson-Mehl.

Se ha realizado un análisis numérico de un problema de solidificación de fundición de hierro con grafito esferoidal. Dicho análisis se ha centrado en el balance de energía y su acoplamiento con el modelo microestructural presentado. Por último, es importante mencionar el buen ajuste alcanzado entre los resultados obtenidos con dicho modelo y las medidas experimentales obtenidas en laboratorio.

REFERENCIAS

- 1 Diego Celentano, "Un Modelo Termomecánico para Problemas de Solidificación de Metales", *Tesis Doctoral*, Universidad Politécnica de Cataluña, Barcelona, España, Mayo de 1994.
- 2 D. Celentano, S. Oller y E. Oñate, "Un Modelo Termomecánico para Problemas de Solidificación de Metales", en los anales del MECOM 94: *Mecánica Computacional Vol. 14*, páginas 363-376 compilado por Sergio Idelsohn y Victorio Sonzogni. Editado por AMCA, Santa Fe, 1994.
- 3 Celentano D., Oller S. and Oñate, "A Coupled Thermomechanical Model for the Solidification of Cast Metals", *International Journal of Solids and Structures*, Vol. 33, No. 5, pp. 647-673, 1996.
- 4 Nacera Hamata, "Modélisation du Couplage entre l'Elasto-Viscoplasticité Anisotherme et la Transformation de Phase d'une Fonte G.S. Ferritique", *Thèse de Doctorat*, Université Paris 6, France, Avril 1992.
- 5 Diego Celentano, Abbass Dabir y Jordi Tartera: "Un modelo viscoplástico para simular la solidificación y el enfriamiento de la fundición de hierro", en los anales del ENIEF'95: 9^o Congreso Sobre Métodos Numéricos y sus Aplicaciones, 6 al 10 de Noviembre de 1995, S. C. de Bariloche, Argentina.
- 6 Diego Celentano, Denis Visconte, Patricia Dardati, Sergio Oller and Eugenio Oñate, "A Thermomechanical Model for Solidification Problems: Experimental Validation", *Proceedings of COMPLAS IV*, pp. 2385-2396, R. Owen, E. Oñate and E. Hinton (Eds.), Pineridge Press/CIMNE, Swansea, held at Barcelona, Spain, 3-6 April 1995.
- 7 Lubliner J. *Plasticity Theory*, Macmillan Publishing (1990).
- 8 Coleman B. and Gurtin M., "Thermodynamics with Internal State Variables", *The Journal of Chemical Physics*, Volume 47, Number 2, 15 July 1967.
- 9 Persyna P. "Thermodynamic Theory of Viscoplasticity", *Advan. Appl. Mech.* 11, 313-354 (1971).

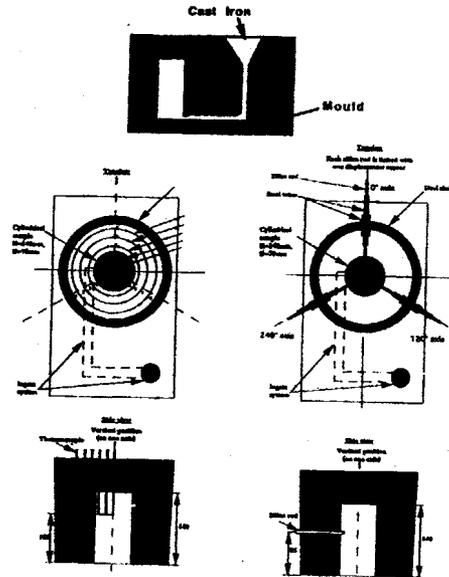


Figura 1. Ensayo de solidificación: esquema y disposición general del experimento.

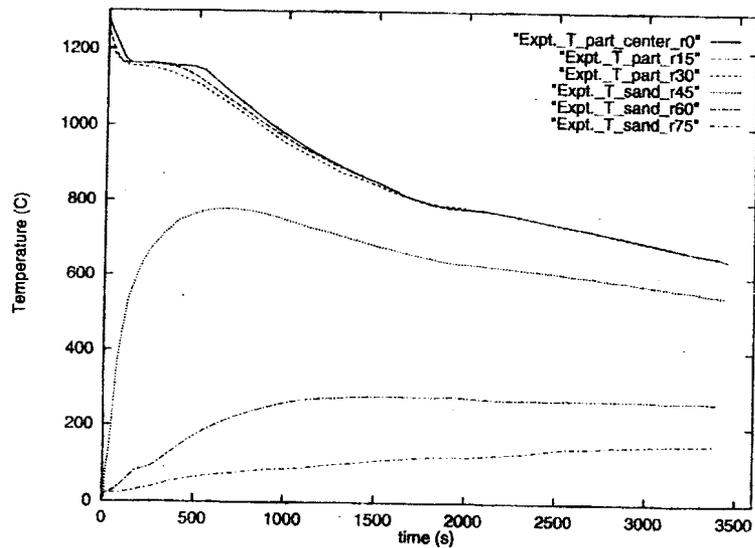


Figura 2. Ensayo de solidificación: resultados experimentales de la evolución de la temperatura en diferentes puntos.

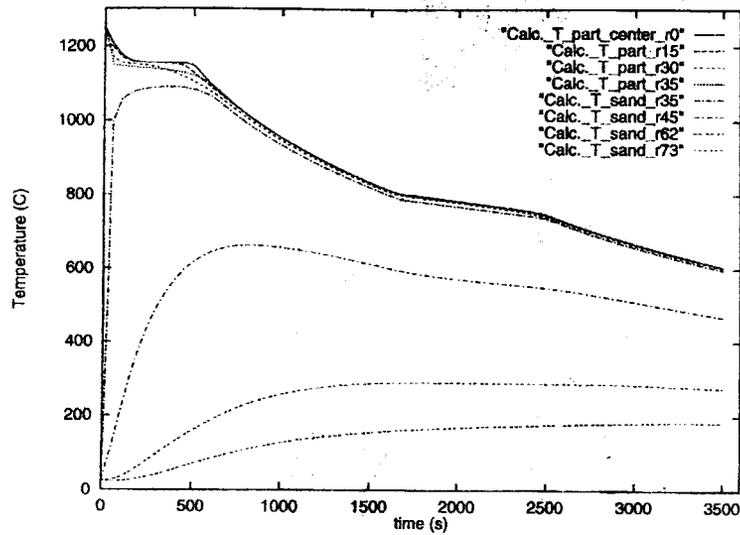


Figura 3. Ensayo de solidificación: resultados calculados de la evolución de la temperatura en diferentes puntos usando un modelo macroscópico para el cambio de fase sólido-sólido

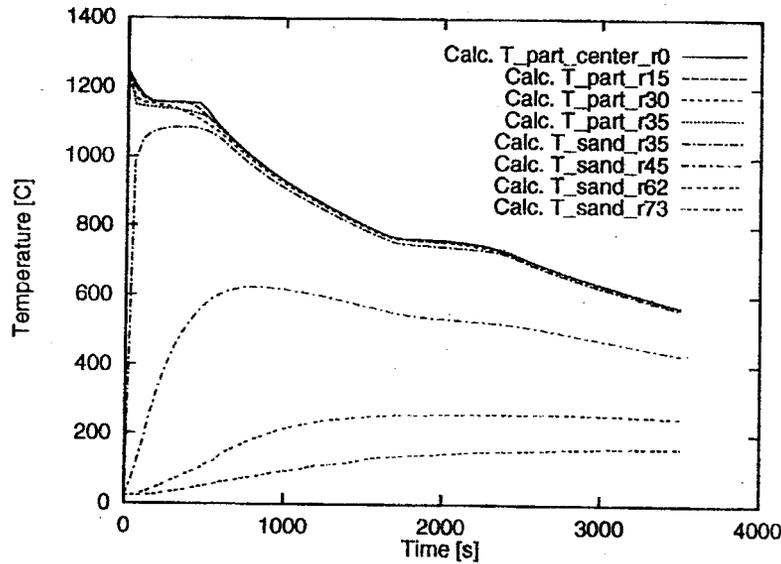


Figura 4. Ensayo de solidificación: resultados calculados de la evolución de la temperatura en diferentes puntos usando un modelo microscópico para el cambio de fase sólido-sólido