

## MODELACION MEDIANTE AUTOMATA CELULAR DE LA MICROMECHANICA EN SOLIDIFICACION DE FUNDICIÓN DE GRAFITO ESFEROIDAL

**Patricia M. Dardati\***, **Luis A. Godoy\*\***, **Germán A. Cervetto\*\*\***, **Pedro J. Paguaga\*\*\***

\*Departamento Ingeniería Industrial, Facultad Regional Córdoba, Univ. Tecnológica Nacional.  
Córdoba, Argentina.

E-mail: [pdardati@industrial.frc.utn.edu.ar](mailto:pdardati@industrial.frc.utn.edu.ar)

\*\* Departamento de Estructuras, Fac. Ciencias Exactas, Físicas y Naturales, Univ. Nac. de Córdoba.  
Córdoba, Argentina.

E-mail: [lgodoy@com.uncor.edu](mailto:lgodoy@com.uncor.edu)

\*\*\* Alumnos de Ingeniería Mecánica Aeronáutica de la Fac. Ciencias Exactas, Físicas y Naturales,  
Univ. Nac. de Córdoba. Córdoba, Argentina.

E-mail: [gercer@tutopia.com](mailto:gercer@tutopia.com) y [paguagapedro@yahoo.com.ar](mailto:paguagapedro@yahoo.com.ar)

**Palabras clave:** Autómata Celular, Solidificación, Fundición dúctil

**Resumen:** *Este trabajo reporta resultados sobre evolución de la microestructura durante la solidificación de una fundición dúctil eutéctica, obtenidos mediante una simulación llevada a cabo con autómatas celulares. Las evolución de la microestructura en un elemento de volumen representativo está dada por modelos de nucleación y de crecimiento que se escriben en forma de reglas, y las reglas se operan en cada celda del autómata para determinar un vector de estado. La evolución permite visualizar de manera simulada el proceso de solidificación a medida que baja la temperatura, y cómo se extiende la parte sólida alrededor de núcleos de grafito. El estudio macromecánico no se incluye en la presentación, sino que se limita al tratamiento de la simulación de la microestructura fijando la evolución de la temperatura. La expectativa de desarrollo futuro consiste en acoplar el modelo presente con los de macro mecánica mediante elementos finitos.*

## 1 INTRODUCCIÓN

Uno de los desafíos actuales en la mecánica computacional es el análisis de la respuesta de sólidos considerando dos o más escalas de análisis. En particular, son de interés en este trabajo los problemas de solidificación equiaxial de una fundición nodular de composición eutéctica. En trabajos previos, los autores y otros investigadores han considerado el problema de macromecánica (que es un problema de transferencia de calor) y la incidencia de la micromecánica se toma en cuenta usando un modelo fenomenológico que se aplica en los puntos de integración de Gauss<sup>4,5</sup>. Este tipo de enfoque evalúa la respuesta promedio de la micromecánica y esa respuesta se acopla a la macromecánica en un esquema local (promedio)-global.

El avance en algoritmos y computadoras, sumado a necesidades de la industria, han posibilitado llevar a cabo una simulación de la respuesta en el nivel micromecánico, de manera de seguir en detalle la evolución de la microestructura. Los primeros trabajos de solidificación en esa dirección son los de Gandin y Rappaz<sup>6</sup>, y Stefanescu<sup>10</sup>. Uno de los métodos más adecuados para modelar la micromecánica parece ser el de autómatas celulares, que se ha empleado en distintos problemas de micromecánica (Bentz *et al.*<sup>1</sup>, Bentz<sup>2</sup>, Matic y Geltmacher<sup>8</sup>). Una ventaja de esta metodología es que permite visualizar la forma específica en la que evoluciona una microestructura dentro de un elemento de volumen representativo.

El objetivo de esta investigación ha sido el desarrollo de un modelo de micromecánica para solidificación de grafito esferoidal usando autómatas celulares. Para ello, la Sección 2 describe el problema físico de solidificación y las bases de la teoría (uninodular) que se ha empleado en esta instancia. En la Sección 3 se presentan detalles de la forma en que se ha implementado el algoritmo de autómatas celulares en este problema. Los resultados para algunos problemas típicos se incluyen en la Sección 4, junto con estudios acerca de la sensibilidad del estado al final de solidificación. En la última sección se presentan algunas conclusiones del estudio y perspectivas de trabajo futuro.

## 2 MODELO MICROESTRUCTURAL DE LA FUNDICIÓN ESFEROIDAL

La fundición de grafito esferoidal o dúctil (conocido en inglés como “SG cast iron”) es de gran importancia en la industria metalúrgica y en diversas áreas de la ingeniería. La forma esférica adoptada por el grafito en este tipo de fundición le confiere a la misma muy buenas propiedades mecánicas, lo que ha permitido reemplazar al acero fundido y al forjado en numerosas aplicaciones. Actualmente prevalecen principalmente dos teorías explicativas para el proceso de solidificación de la fundición nodular: la teoría uninodular<sup>9</sup>, que propone que el crecimiento de la austenita ocurre en la forma de una capa esférica envolviendo los nódulos de grafito y la teoría multinodular, que plantea la nucleación independiente de la austenita y el crecimiento dendrítico de la misma. En este trabajo se simula el proceso de solidificación de una fundición nodular de composición eutéctica mediante la técnica de autómatas celulares siguiendo la teoría uninodular.

## 2.1 Bases de la teoría uninodular

El proceso de solidificación de una fundición nodular de composición eutéctica según la teoría uninodular puede ser resumido, en forma general, en los siguientes postulados <sup>11</sup>:

1. El carbono nuclea cristalizando como grafito sobre ciertas partículas que están presentes en el líquido (nucleación heterogénea).
2. La forma esférica es causada por influencias químicas o físicas sobre el crecimiento del cristal de grafito.
3. El crecimiento de los nódulos de grafito ocurre por deposición de carbono directamente desde el líquido durante un corto período de tiempo.
4. Muy pronto los nódulos de grafito son rodeados por una capa esférica de austenita.
5. El crecimiento de los nódulos de grafito y de la envoltura de austenita continúa por la difusión del carbono desde el líquido hacia el nódulo de grafito a través de la austenita.

El presente modelo microestructural implementado simula la solidificación equiaxial de una fundición nodular de composición eutéctica.

## 2.2 Composición en las interfases

Se analiza la solidificación de una fundición dúctil de composición eutéctica, es decir no se considera la aparición de austenita ni de grafito primario. Se tiene en cuenta la influencia del silicio considerando el diagrama de equilibrio ternario Fe-C-Si. Esto se logra usando un diagrama de equilibrio en dos dimensiones pero cuyas líneas de líquidus, sólidus y temperatura de equilibrio eutéctica están definidas por funciones que dependen del contenido de silicio (Si) y de carbono (C) en la fundición, que se especifican en el Apéndice.

## 2.3 Nucleación del grafito

Se utiliza una ley de nucleación continua <sup>9</sup>:

$$\dot{N} = A \cdot \Delta T^n \quad (1)$$

donde el punto sobre las variables indica derivada temporal;  $N$  es la densidad de nucleación,  $A$  es un parámetro que dependen de la composición de la fundición y del tratamiento de inoculación a la que se somete el líquido y  $\Delta T = T_E - T$  es el sobreenfriamiento del líquido. En el presente trabajo se adopta  $n=1$ . Se considera que la nucleación se detiene cuando comienza la recalcancia, fenómeno que puede ocurrir si la velocidad de generación del calor latente por el cambio de fase es mayor a la de extracción de calor del elemento que solidifica.

## 2.4 Crecimiento de los nódulos de grafito

Según el modelo uninodular adoptado, el grafito queda rodeado por una capa de austenita inmediatamente después de nuclear. Los radios iniciales adoptados para los nódulos del grafito y para las envolturas esféricas de austenita son  $1 \mu\text{m}$  y  $1,2 \mu\text{m}$  respectivamente.

Para el crecimiento del grafito en contacto con la austenita se usa la fórmula presentada por Su *et al.* <sup>9</sup>, que plantea el crecimiento del grafito controlado por la difusión del carbono a través de la austenita en un proceso cuasi-estacionario, según la expresión:

$$\dot{r} = \frac{(C^{\gamma/l} - C^{\gamma/gr}) \rho_{\gamma}}{(C^{gr} - C^{\gamma/gr}) \rho_{gr}} \frac{D_c^{\gamma}}{r \left(1 - \frac{r}{s}\right)} \quad (2)$$

donde  $r$  es el radio del nódulo de grafito,  $\rho_{\gamma}$  y  $\rho_{gr}$  son las densidades de la austenita y el grafito respectivamente,  $D_c^{\gamma}$  es el coeficiente de difusión del carbono en la austenita y  $s$  es el radio de la cápsula de austenita (ver Figura 1).

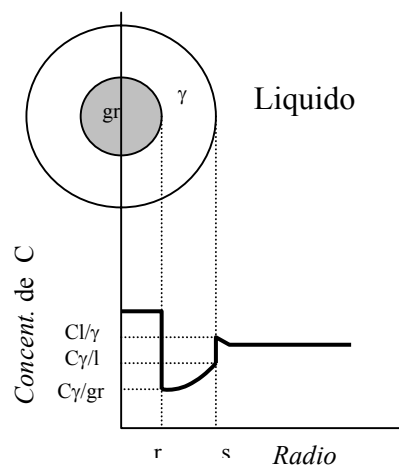


Figura 1: Distribución de la concentración de carbono en el nódulo de grafito y la cápsula de austenita.

### 2.5 Crecimiento de la esfera de austenita

Para el crecimiento de la esfera de austenita que encapsula al nódulo de grafito se utiliza la expresión propuesta por Su *et al.*<sup>9</sup>

$$\dot{s} = \frac{(C^{\gamma/l} - C^{\gamma/gr})}{(C^{l/\gamma} - C^{\gamma/l})} \frac{D_c^{\gamma}}{s \left(\frac{s}{r} - 1\right)} \quad (3)$$

En las ecuaciones (2-3) se adopta un valor constante para la relación  $\frac{s}{r} = 2,3809$ .<sup>9, 12</sup>

## 3 ALGORITMO DE AUTOMATA CELULAR (AC)

Para modelizar la solidificación de una aleación eutéctica de fundición nodular, se usó la técnica de autómatas celulares, AC. En un AC el dominio en estudio se divide usando una grilla regular, como si fuese un tablero de juego. En cada celda de la grilla se trabaja con un vector de estado. A diferencia de los problemas definidos sobre un continuo, en los que las variables de estado están gobernadas por ecuaciones diferenciales, en los AC el vector de

estado se evalúa usando reglas de producción, que involucran los vectores de estado de las celdas vecinas. El algoritmo avanza en el tiempo y se van modificando las características de las celdas.

Las principales características de un AC son:

- *Tablero.* Es una grilla de celdas en la que se realizan las actualizaciones del vector de estado.
- *Estados de cada celda.* Cada celda puede tener un número finito de estados  $k$ . Si hay  $N$  celdas, entonces en total hay  $k^N$  estados posibles.
- *Determinismo.* Las reglas que fijan el valor de cada celda en un momento determinado son deterministas. Se calculan con el valor que haya en la celda y en sus vecinas en el tiempo anterior.
- *Homogeneidad.* No importa qué parte del tablero se considere, los estados posibles y las reglas son las mismas.
- *Localidad.* No hay efectos diferidos en el tiempo ni interacciones globales.

La simulación mediante AC es un tipo poco común de computación. En lugar de tener muchos tipos de memoria, instrucciones y procesadores en una computadora convencional, sólo requiere almacenar la información de una grilla y la implementación de una regla local para actualizar la información, de manera que los requerimientos de hardware son modestos. En ese sentido se parece a los métodos de relajación en diferencias finitas, o al método de Cross en análisis estructural.

En el caso específico de este estudio, se modeló una matriz para el crecimiento del grafito y otra para la austenita. Los datos más importantes que requiere este AC son:

- Curva o tabla de temperatura;
- Intervalo de tiempo;
- Concentraciones de carbono y silicio de la aleación;
- Densidad del grafito y de la austenita;
- Coeficientes de difusión del carbono en el líquido y en la austenita.

El modelo que se presenta tiene la originalidad que considera dos grillas de autómatas acopladas. Una de las grillas está destinada a representar la evolución de nódulos de grafito y se identifica como una matriz llamada  $W$ , de  $N \times N$  celdas. La evolución de austenita se identifica mediante una matriz  $M$ , de  $N \times N$  celdas que coinciden topológicamente con las celdas de  $W$ . Cada celda (tanto en  $W$  como en  $M$ ) tiene dimensiones de una longitud, y se ha dispuesto un tamaño de celda (denominado  $wc$ ) tal que  $wc = 5 \mu\text{m}$ . El número de celdas adoptado en la grilla es de  $N = 100$ , lo que produce un número total de celdas en el tablero de  $100 \times 100 = 10.000$ , o bien una medida de  $250.000 \mu\text{m}^2$ .

Las características de cada celda en la matriz  $W$  son su posición dentro de la grilla (identificada mediante la fila  $i$ , columna  $j$ ), y el radio del grafito en cada celda,  $r(i,j)$ .

En los autómatas celulares hay que tener cuidado para que la configuración resultante no dependa del sentido de recorrido por la grilla. Para evitar ese problema, en cada paso se genera una grilla auxiliar  $C$  para el grafito, en la que se copia sólo el crecimiento del grafito en ese paso. De manera similar, para la austenita se genera una matriz auxiliar  $Ca$ .

Para simplificar el proceso de programación, se utilizó un programa base (scrip) escrito en lenguaje MATLAB en el que se toman los datos necesarios y se definen las siguientes subrutinas:

- *Parámetros dependientes de temperatura*
- *Nucleación del grafito*
- *Velocidad de crecimiento del radio de grafito*
- *Crecimiento del grafito*
- *Actualización del grafito*
- *Nucleación de la austenita*
- *Velocidad de crecimiento de austenita*
- *Crecimiento de la austenita*
- *Actualización de la austenita*
- *Graficación*
- *Cálculo de fracción sólida*

En lo que sigue se describe brevemente cada subrutina.

- *Parámetros dependientes de temperatura.* Los parámetros dependientes de la temperatura que es necesario calcular son la temperatura media del intervalo, las concentraciones de carbono en las interfases para esa temperatura y la temperatura eutéctica (ver Apéndice).
- *Nucleación de grafito.* Para la nucleación del grafito el algoritmo procede de la siguiente manera:
  - Se verifica si hay recalescencia (fin de la nucleación).
  - Se determina la cantidad de núcleos que surgen, para el subenfriamiento de la iteración correspondiente.
  - Por medio de un cálculo de función aleatoria, se procede al posicionamiento de dichos núcleos, teniendo en cuenta que si en dichas posiciones hay sólido, no se permite la nucleación. De esta manera se tiene en cuenta la disminución de la probabilidad de nucleación cuando se reduce la fracción líquida sin necesidad de la utilización de los coeficientes de corrección que se requieren en otro tipo de simulaciones.
  - Para la nucleación se considera que el radio inicial del núcleo de grafito es igual a  $1\mu\text{m}$ .
- *Velocidad de crecimiento del radio de grafito.* Esta subrutina, se encuentra dentro de la subrutina de crecimiento, debido a que para cada celda (posición y radio), se calcula su correspondiente velocidad de crecimiento, lo que origina un incremento de radio  $\Delta r$ . Para este modelo <sup>9</sup> se considera que la velocidad de crecimiento del grafito es isótropa y dada por la fórmula (2).
- *Crecimiento de grafito.* Una vez posicionados en la celda en la cual se encuentra un núcleo de grafito, se calcula la velocidad de crecimiento correspondiente, y luego esta velocidad es multiplicada por el paso de tiempo  $\Delta t$  para obtener el incremento del radio del nódulo de grafito que se suma al valor de radio anterior de la celda. Como la celda tiene un valor máximo ( $w_c=5\mu\text{m}$ ), si este valor es superado, el algoritmo asigna a las

celdas vecinas el incremento de radio correspondiente  $\Delta r +$  el residuo ( $Res = W_{i,j} - wc$ ). Además es asignado el valor de radio actualizado de la posición ( $r_{i,j} + \Delta r$ ), para poder calcular la velocidad de crecimiento en la próxima iteración.

Como forma de asignar los valores a la vecindad (y a fin de representar lo mejor posible la forma esférica del grafito), se adoptó la vecindad de Moore, dando el valor completo a las celdas en cruz y un porcentaje a las celdas en diagonal, como se ilustra en la Figura 2. Para esto, y a fin de saltar deformaciones en el autómata, se guardan estos valores en la matriz auxiliar  $C$ , y se actualiza el estado de todas las celdas al finalizar el ciclo (Figura 3).

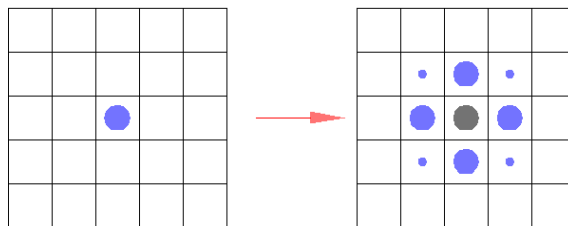


Figura 2: Funcionamiento de un autómata según ley de crecimiento de Moore.

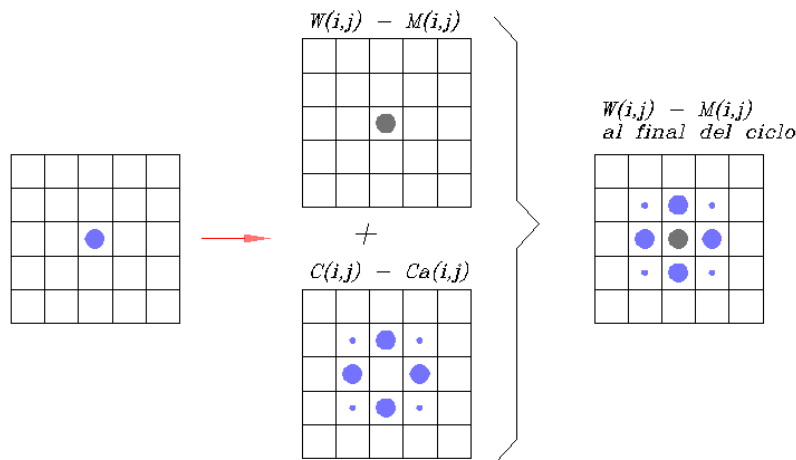


Figura 3: Funcionamiento de los algoritmos del programa.

- **Actualización del grafito.** Debido a que los incrementos de radio no son números enteros ni valores predeterminados, puede ocurrir que el valor de incremento de radio a repartir en la vecindad exceda el valor crítico de celda ( $wc$ ), con lo que la representación, que se basa en graficar celdas con valor distinto de cero, no coincidiría con el valor total calculado para esa misma iteración. Para evitarlo, se recorre nuevamente la matriz utilizando el algoritmo de crecimiento, pero sin calcular nuevos incrementos de radio, al solo efecto de

que no quede ningún valor de celda por encima del valor crítico que no haya asignado incrementos a la vecindad. Luego se procede a seguir con la rutina del algoritmo.

- *Nucleación de austenita.* En este modelo la posición de los núcleos de austenita es directamente asignada por la posición de los núcleos de grafito, pero a los fines de generalizar el algoritmo para los modelos en los que la austenita presenta nucleación independiente esta parte del cálculo se ha sistematizado como una subrutina.
- *Velocidad de crecimiento de austenita.* La velocidad de crecimiento de la austenita se calcula, al igual que se hace con el grafito, en una subrutina dentro de la subrutina de crecimiento. El cálculo se basa en la ecuación (3).
- *Crecimiento de la austenita.* En este modelo se utiliza un algoritmo de autómatas celular similar al descrito para el grafito. Los incrementos de radio de austenita  $\Delta r$  son calculados multiplicando la velocidad de crecimiento de la austenita por el paso de tiempo  $\Delta t$ . El fenómeno de interferencia entre granos se tiene en cuenta preguntando, previamente a la asignación a la vecindad, si ya existe sólido en la misma, efectuándose la asignación sólo en aquellas celdas en las que hay líquido. A los efectos de distinguir los contornos de grano al final de la solidificación, la matriz de austenita  $M$ , tiene una dimensión más que su homóloga  $W$  (de grafito). En esta dimensión se guarda una propiedad de identidad de grano (color) que es transmitida al asignar los valores hacia la vecindad.
- *Actualización de la austenita.* Para la actualización de la matriz  $M$  se sigue el mismo procedimiento que para la actualización de la matriz  $W$ .
- *Graficación.* Para la visualización del estado del tablero se superponen dos gráficos, primero el correspondiente a la austenita y luego el del grafito. La austenita debe graficarse punto por punto debido a la representación de los granos de distintos colores y a la interferencia anteriormente mencionada. El grafito es representado por gráfica completa.
- *Cálculo de fracción sólida.* Para la determinación de la fracción sólida se lleva a cabo un conteo de las celdas en estado sólido mediante un recorrido completo de las matrices ( $W$  y  $M$ ) al final de cada ciclo. El resultado del conteo es dividido por el número total de celdas. El valor de esta fracción sólida permite decidir cuándo finaliza la representación, ya sea porque ha solidificado completamente la aleación, o bien han dejado de ser significativos los resultados.

Una particularidad de la implementación de AC en este trabajo, con el fin de mejorar la velocidad de ejecución, es que no se recorre la matriz completa, sino que se recorre la grilla mediante la lógica de programación considerando aquellas celdas que han sido asignadas, y dejando de lado las celdas que contienen valores nulos. Recordar que las reglas a cumplir se imponen celda por celda, y de esta forma, se ahorran ciclos de operaciones que no aportan nueva información.

Tanto el autómata del grafito como el de la austenita, corren en paralelo y se interrelacionan, con lo que es posible implementar nuevas teorías con sólo modificar las



ecuaciones apropiadas. Los autómatas no están en la misma rutina, con lo que se puede cambiar uno de ellos sin afectar el funcionamiento del otro, más que en los valores de las propiedades relacionadas. Se podría plantear la vinculación de más de dos tableros, sin mayores inconvenientes.

#### 4 RESULTADOS

En la Figura 4 se presentan los resultados de un cálculo realizado sobre una superficie de  $250000 \mu\text{m}^2$  y con un parámetro de nucleación  $A=100$ . Los nódulos de grafito se representan en color azul y la austenita en distintos tonos de grises. El valor de  $k$  indica el número de la iteración que, en este caso, coincide con el tiempo transcurrido desde el inicio del proceso ya que  $\Delta t = 1$ . Para cada iteración graficada se indica también la fracción sólida correspondiente.

En la Figura 5 se grafican en paralelo los resultados de dos cálculos realizados con los mismos datos. Se observan pequeñas diferencias en la cantidad final de nódulos de grafito; esto se debe a que el posicionamiento de los núcleos responde a una función aleatoria y, si en la posición asignada al núcleo por dicha función ya hay sólido, esa nucleación se cancela. La máxima diferencia en la fracción sólida para iteraciones iguales es del orden del 6 %. Para valores elevados de fracción sólida se observan muchas interferencias entre los nódulos de grafito, esto no concuerda con las observaciones realizadas en casos reales. Puede observarse que la forma de los nódulos tiende a ser cuadrada, esto se puede atribuir a la utilización de la representación de Moore.

En la Figura 6 se presentan en paralelo los resultados de dos cálculos realizados con diferentes valores del parámetro de nucleación  $A$  usado en la ecuación (1). Se observa que para tiempos iguales la fracción sólida es mayor en el caso de mayor nucleación ( $A=200$ ). Por otro lado también se aprecia que cuanto menor es el número de núcleos, mayor es su diámetro para una fracción sólida similar.

#### 5 CONCLUSIONES

En este trabajo se ha implementado un modelo de solidificación equiaxial para simular el crecimiento del grafito esferoidal, usando una técnica de autómata celular. El modelo físico adoptado es el de Su *et al.*, pero la implementación mediante AC tiene características originales que facilitan la simulación. En particular, el grafito y la austenita se representan de manera separada en dos AC, cada uno abarcando el volumen representativo y de forma que se establece correspondencia entre ambas grillas. Para la solución, las dos grillas se resuelven de manera acoplada, a fin de tener en cuenta la interacción física entre ambas componentes.

La simulación permite visualizar los estados de la micro-mecánica para tiempos (o temperaturas) diferentes, de manera que se representa lo que se vería en un proceso de solidificación. Esto representa una ventaja considerable con respecto a modelos anteriores fenomenológicos, en los que las características se obtienen en sentido promedio.

Mediante AC es posible llevar a cabo estudios paramétricos, para considerar de que manera inciden los parámetros del modelo sobre la configuración micro-mecánica cuando se completa la solidificación o en situaciones intermedias.

Debido a que el modelo contiene asignaciones aleatorias, en este trabajo se comparan resultados de corridas que parten de ubicaciones diferentes de núcleos iniciales. La conclusión es que el estado final a que se llega contiene aproximadamente el mismo número de núcleos y de tamaños similares, y lo que varía es su posición dentro del elemento de volumen representativo.

Trabajos futuros en esta área prevén modelar otras posibilidades físicas, en las cuales la austenita evolucione en forma dendrítica y de manera independiente del grafito. Como meta final, estos modelos de micro-mecánica evolutiva se acoplaran a la macro-mecánica térmica, a fin de resolver el problema micro-macro acoplado.

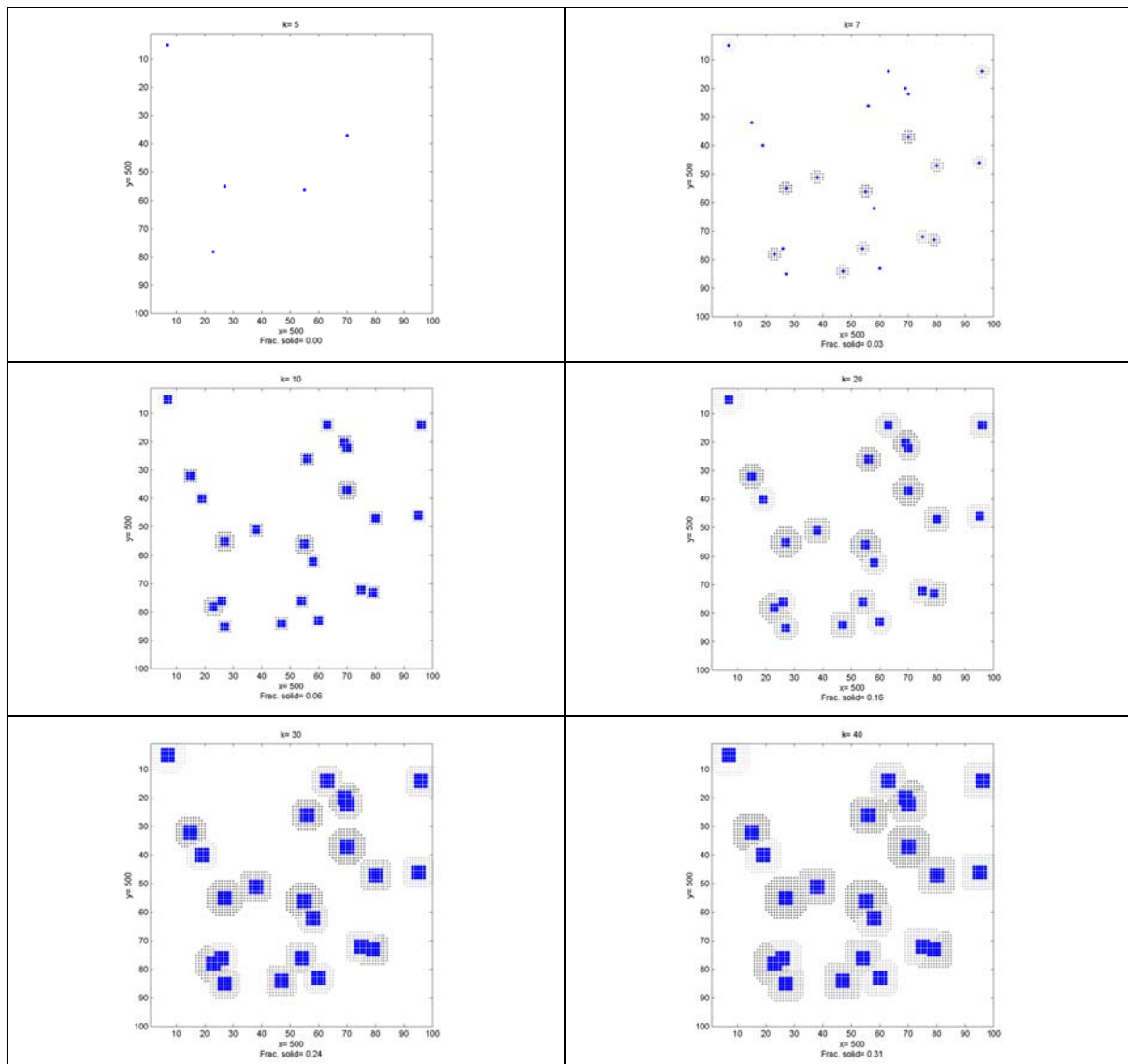


Figura 4

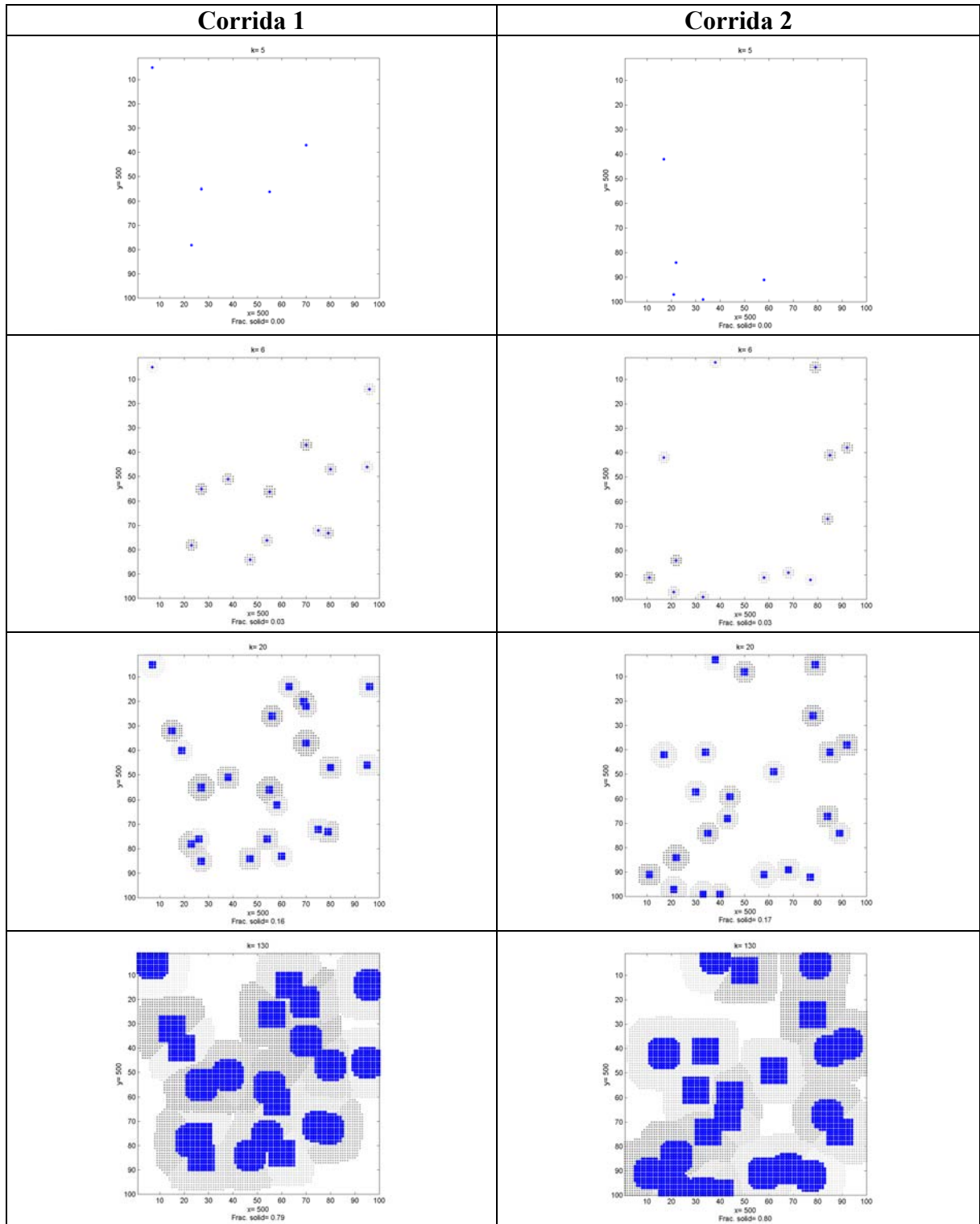


Figura 5

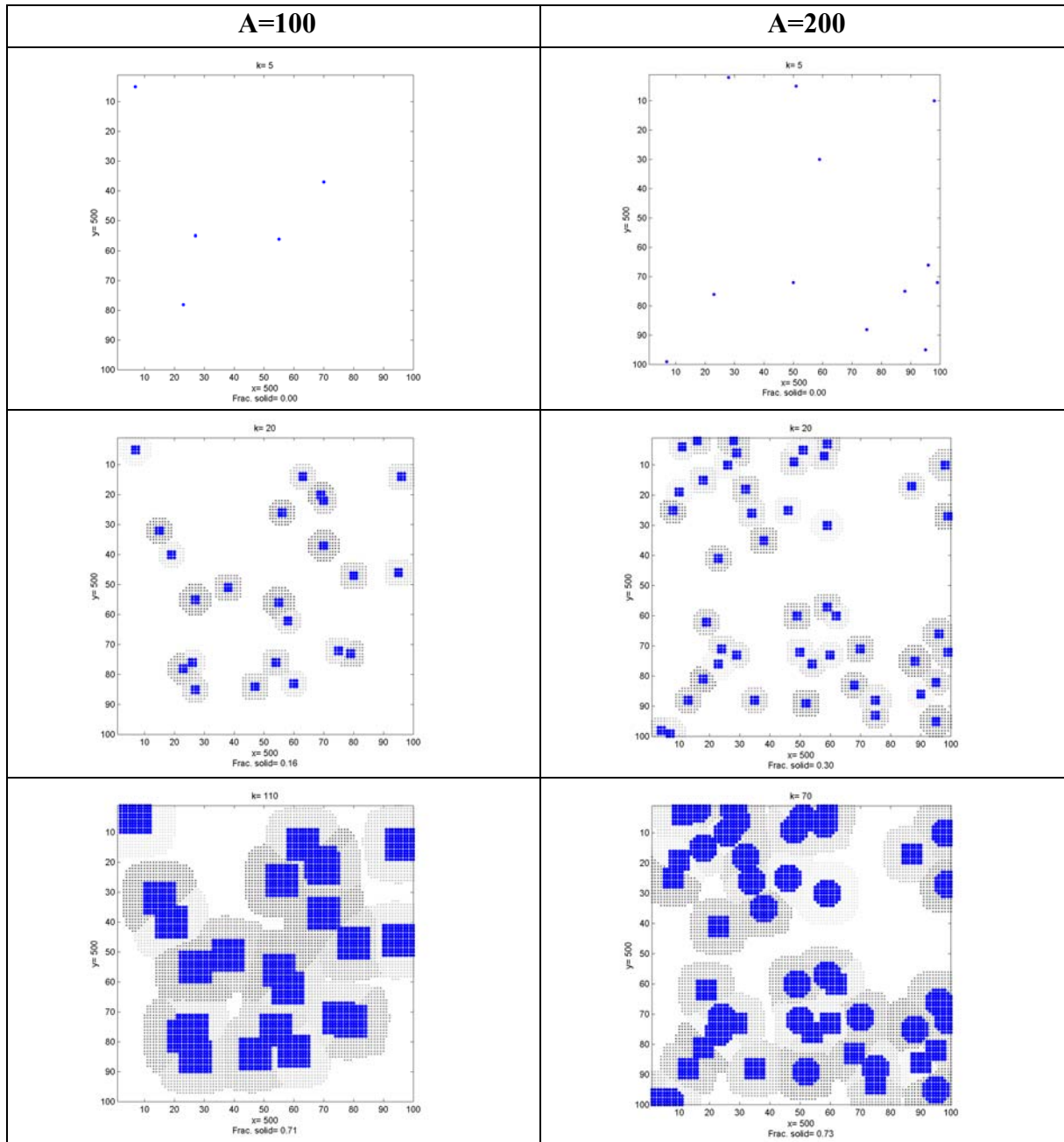


Figura 6. Influencia del parámetro de nucleación  $A$ .

## 6 AGRADECIMIENTOS

Los autores agradecen el apoyo brindado a este trabajo por la Agencia Córdoba Ciencia y por el CONICET a través de subsidios.

## 7 REFERENCIAS

- [1] D. Bentz, P. Coveney, E. Garboczi, M. Kleyn, P. Stutzman, Cellular Automaton Simulations of Cement Hydration and Microstructure Development, *Modelling Simul. Mater. Sci. Eng.*, Vol 2, pp. 783-808 (1994).
- [2] D. Bentz, Three-Dimensional Computer Simulation of Portland Cement Hydration and Microstructure Development, *Journal Am. Ceram. Soc.*, Vol 80 [1], pp. 3-21 (1997).
- [3] R. Boeri, The Solidification of Ductile Cast Iron, Tesis Doctoral, University of British Columbia, Canadá (1989).
- [4] P. Dardati, D. Celentano, L. A. Godoy, R. Boeri, Simulación Numérica del Proceso de Solidificación de la Fundición Dúctil, *Mecánica Computacional*, Vol. XXI, pp. 2855-2874 (2002).
- [5] P. Dardati, D. Celentano, L. A. Godoy, R. Boeri, Numerical Simulation of Solidification Processes of Spheroidal-Graphite Cast Iron, *Journal of Computational Methods in Sciences and Engineering*, en proceso de revisión.
- [6] Ch. Gandin, M. Rappaz, A coupled finite element-cellular automaton model for the prediction of dendritic grain structures in solidification processes, *Acta Metall. Mater.*, vol. 42(7), pp. 2233-2246 (1994).
- [7] R. W. Heine, The Fe-C-Si Solidification Diagram for Cast Irons, *AFS Transactions*, 86-71, pp. 391-402 (1986).
- [8] P. Matic, A. Geltmacher, A cellular automaton-based technique for modeling mososcale damage evolution, *Computational Material Science*, vol. 20, pp. 120-141 (2001).
- [9] K. Su, I. Ohnaka, I. Yamauchi y T. Fukusako, "Computer Simulation of Solidification of Nodular Cast Iron", Proceedings of the *Third International Symposium on the Metallurgy of Cast Iron*. Estocolmo, agosto 29-31, pp. 181-189 (1984).
- [10] D. Stefanescu, Methodologies for modeling of solidification microstructure and their capabilities, *ISIJ Int.*, vol. 35(6), pp. 637-650 (1995).
- [11] C. Van de Velde, "A New Approach to the Solidification of Cast Iron", <http://members.tripod.lycos.nl/cvdv>
- [12] S. Wetterfall, H. Fredriksson, M. Hillert, Solidification Process of Nodular Iron, *Journal Iron Steel Institute*, Vol. 210 part I, pp. 323-333 (1972).

## APENDICE

En este trabajo se supone que las líneas del diagrama de equilibrio se pueden representar de acuerdo a las expresiones <sup>3,7</sup>:

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

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

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

$$T_E = 1154.6 + 6.5Si \quad (\text{A.1})$$

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

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

$$C_{TE} = 2.1 - 0.216Si \quad (\text{A.2})$$

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

$$C_E = 4.26 - 0.317Si \quad (\text{A.3})$$

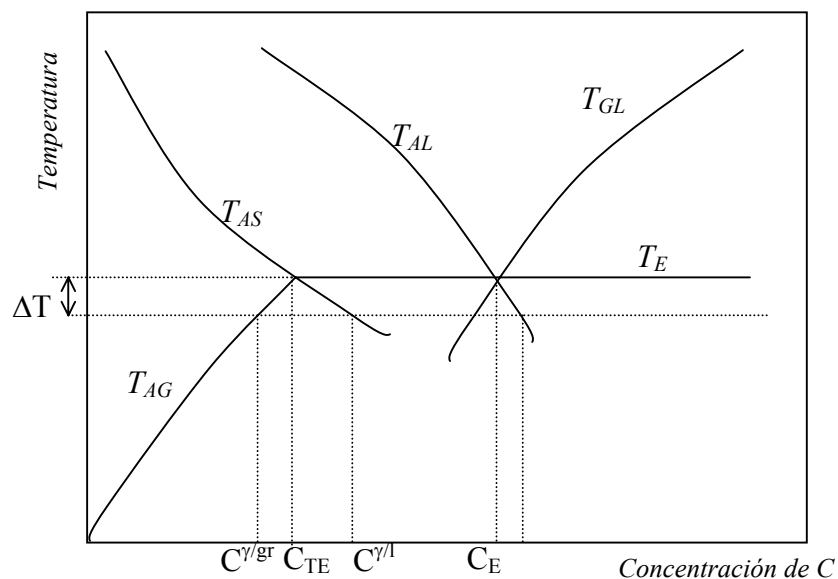


Figura A.1: Esquema de la región eutéctica de un diagrama un Fe-C-Si para un determinado porcentaje de Si.

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

$$\begin{aligned} C^{\gamma/\gamma} &= \frac{1}{97.3}(1569 - T - 24.32Si) \\ C^{\gamma/l} &= \frac{1}{177.9}(1528.4 - T - 32Si) \\ C^{\gamma/gr} &= \frac{1}{389.1}(T - 129.7Si + 503.2) \end{aligned} \quad (\text{A.4})$$

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

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

Como se puede ver en el diagrama de la Figura A.1, las curvas se hacen continuar por debajo de la temperatura eutéctica, de manera que si la temperatura baja por debajo de dicha temperatura y todavía sigue la solidificación, se tienen en cuenta esas prolongaciones para calcular las concentraciones de carbono de las distintas fases en las interfases. Esto quiere decir que se considera que, en las interfases, se cumplen las condiciones de equilibrio termodinámico.