



**UNIVERSIDAD NACIONAL DE CÓRDOBA**  
FACULTAD DE CIENCIAS EXACTAS, FÍSICAS Y NATURALES  
DOCTORADO EN CIENCIAS DE LA INGENIERÍA

---

**SIMULACIÓN MICROMECAÁNICA DE LA  
SOLIDIFICACIÓN DE LA FUNDICIÓN DÚCTIL**

por

*Patricia Mónica Dardati*

Tesis para obtener el grado de Doctora en Ciencias de la Ingeniería

Comisión Asesora:

*Dr. Luis A. Godoy (Director)*

*Dr. Diego J. Celentano*

*Dr. Héctor R. Bertorello*

Abril 2005

## **AGRADECIMIENTOS**

Quiero expresar mi especial agradecimiento a mi director de tesis el Dr. Luis Godoy y a los miembros de la comisión asesora de tesis los Drs. Diego Celentano y Héctor Bertorello que me ayudaron aportando su experiencia y conocimientos y ofreciéndome permanentemente su aliento e incondicional apoyo.

Agradezco a la Universidad Tecnológica Nacional y especialmente a la Facultad Regional Córdoba por haberme brindado la posibilidad de perfeccionarme otorgándome una beca para estudios de postgrado y por haberme facilitado las instalaciones para el desarrollo de este trabajo. Muchas gracias al Dr. Luis Canali y a los demás miembros de CIII que me dieron su apoyo y colaboración permanente.

También quiero agradecer a Germán Cervetto y a Pedro Paguaga cuyo trabajo constituye la base del capítulo VI de esta tesis.

Agradezco al Dr. Omar Ortiz por su ayuda en los desarrollos matemáticos, al Ingeniero Marcelo Theiler por el aporte de su experiencia práctica y al Licenciado R. Mancini por posibilitarme el acceso a importante bibliografía.

Muchas gracias también al INTEMA de Mar del Plata, especialmente a los Doctores Roberto Boeri y Jorge Sikora cuyo aporte marcó un punto fundamental en el desarrollo de esta tesis.

Agradezco al CONICET y a la Agencia Córdoba Ciencia cuyos subsidios permitieron la asistencia a importantes congresos y encuentros científicos.

PATRICIA M. DARDATI

# INDICE

<b>CAPÍTULO I</b>	<b>5</b>
<b>INTRODUCCIÓN</b>	<b>5</b>
I.1. Consideraciones generales	5
I.2. Objetivo	6
I.3. Contenido	7
<b>CAPÍTULO II</b>	<b>9</b>
<b>CONCEPTOS METALÚRGICOS SOBRE SOLIDIFICACIÓN Y FUNDICIONES DE HIERRO</b>	<b>9</b>
II.1. Introducción	9
II.2. Solidificación de metales y aleaciones	9
II.3. Fundiciones de hierro	21
II.4. Fundición nodular	22
II.5. Teorías explicativas del proceso de solidificación de la fundición nodular	24
<b>CAPÍTULO III</b>	<b>27</b>
<b>MODELOS PARA LA SOLIDIFICACIÓN DE LA FUNDICIÓN NODULAR: REVISIÓN BIBLIOGRÁFICA</b>	<b>27</b>
III.1. Introducción	27
III.2. Tratamiento macromecánico de la solidificación	29
III.3. Modelos microestructurales de solidificación	31
III.4. Conclusiones	48
<b>CAPÍTULO IV</b>	<b>51</b>
<b>MODELO UNINODULAR</b>	<b>51</b>
IV.1. Introducción	51
IV.2. Modelo microestructural de la fundición esferoidal	51
IV.3. Análisis de sensibilidad del modelo microestructural	58
IV.4. Conclusiones	63
<b>CAPÍTULO V</b>	<b>65</b>
<b>MODELO PLURINODULAR</b>	<b>65</b>
V.1. Introducción	65
V.2. Modelo microestructural de la fundición esferoidal	65
V.3. Análisis de sensibilidad del modelo microestructural	71
V.4. Conclusiones	76

<b>CAPÍTULO VI</b>	<b>79</b>
<b>SIMULACIÓN DE LA SOLIDIFICACIÓN UNINODULAR MEDIANTE EL MÉTODO DE AUTÓMATA CELULAR</b>	<b>79</b>
VI.1. Introducción	79
VI.2. Modelo microestructural de la fundición esferoidal	79
VI.3. Modelo de autómata celular	81
VI.4. Algoritmo de autómata celular	84
VI.5. Resultados	88
VI.6. Conclusiones	94
<b>CAPÍTULO VII</b>	<b>95</b>
<b>NUEVO MODELO MICROESTRUCTURAL DE SOLIDIFICACIÓN DE FUNDICIÓN NODULAR</b>	<b>95</b>
VII.1. Introducción	95
VII.2. Crecimiento dendrítico equiaxial. Hipótesis básicas	96
VII.3. Modelo microestructural de la fundición esferoidal	97
VII.4. Diagrama de flujo	121
VII.5. Conclusiones	122
<b>GLOSARIO</b>	<b>127</b>
<b>CAPÍTULO VIII</b>	<b>131</b>
<b>ANÁLISIS DEL COMPORTAMIENTO MICROMECAÁNICO DEL MODELO</b>	<b>131</b>
VIII.1. Introducción	131
VIII.2. Caso base	131
VIII.3. Influencia del parámetro de nucleación $A$	133
VIII.4. Influencia del parámetro de nucleación $b$	134
VIII.5. Influencia del parámetro de nucleación $c$	135
VIII.6. Influencia de la velocidad de enfriamiento	135
VIII.7. Influencia del paso de tiempo	136
VIII.8. Conclusiones	137
<b>CAPÍTULO IX</b>	<b>161</b>
<b>EJEMPLOS DE APLICACIÓN</b>	<b>161</b>
IX.1. Introducción	161
IX.2. Probeta cilíndrica de 40 mm de diámetro (caso I)	161
IX.3. Probeta cilíndrica de 80 mm de diámetro (caso II)	171
IX.4. Modificación de las condiciones de nucleación para el modelo plurinodular B	182
IX.5. Conclusiones	184

<b>CAPÍTULO X</b>	<b>187</b>
<b>CONCLUSIONES Y LINEAS FUTURAS DE INVESTIGACIÓN</b>	<b>187</b>
X.1. Resumen de los principales desarrollos de esta tesis	187
X.2. Conclusiones	188
X.3. Contribuciones originales de esta tesis	188
X.4. Líneas futuras de investigación	189
<b>REFERENCIAS</b>	<b>193</b>
<b>APÉNDICE I</b>	<b>199</b>
<b>APÉNDICE II</b>	<b>217</b>



# *CAPÍTULO I*

## **INTRODUCCIÓN**

### **I.1. CONSIDERACIONES GENERALES**

La obtención de objetos por medio del colado y moldeo de metales o aleaciones es una práctica de gran antigüedad. Actualmente, entre los materiales más empleados para la obtención de productos mediante el uso de dicho proceso se encuentran las aleaciones de hierro con porcentajes de carbono superiores al 2 % , llamadas genéricamente fundiciones.

Es evidente que, para la producción de piezas de formas complicadas, el moldeo resulta mucho más conveniente que otros métodos en los que se requiere el maquinado o la deformación del material. Sin embargo, la obtención de piezas sanas y materiales que posean las propiedades requeridas no resulta para nada sencillo y son muchos los problemas con los que el metalurgista debe enfrentarse para conseguirlo. Entre los variados defectos que una pieza fundida puede presentar, es posible mencionar rechupes, fisuras y deformaciones, pero también puede provocar su rechazo una microestructura inadecuada ya que es ésta la que determina las propiedades físicas del material.

Los factores que influyen en el resultado del proceso de obtención de piezas de fundición son numerosos y la interacción entre ellos intrincada. Es por esto que lograr el diseño de un proceso que produzca una estructura que alcance las propiedades mecánicas esperadas requiere de una gran experiencia y, en muchos casos, cumplir con el desarrollo de etapas de prueba y error muy costosas en tiempo y dinero. La modelización y simulación computacional resultan entonces herramientas de gran importancia ya que contribuyen a ajustar las condiciones de fundición y el diseño de la pieza, disminuyendo así la necesidad de largos y onerosos ensayos con prototipos.

El tratamiento numérico de un fenómeno físico requiere de un profundo conocimiento del mismo y éste implica, sin lugar a dudas, numerosas y serias investigaciones de carácter experimental. Sin embargo, también es cierto que las mismas simulaciones computacionales pueden servir de ayuda para conocer mejor el fenómeno que se estudia convirtiéndose en verdaderas herramientas de investigación auxiliar [40].

De los distintos tipos de fundiciones de hierro, la fundición nodular o también llamada fundición de grafito esferoidal, fundición dúctil o simplemente hierro dúctil es de gran 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. Se puede decir que esta fundición es una aleación que combina las excelentes propiedades de colabilidad de la fundición gris y la elevada resistencia del acero, lo que ha contribuido a que, desde su descubrimiento a mediados del siglo pasado, su producción haya aumentado

significativamente y reemplace actualmente al acero fundido y al forjado en numerosas aplicaciones, disminuyendo así costos y dificultades de fabricación.

Normalmente las composiciones empleadas en la producción son cercanas a la eutéctica, de manera que durante el enfriamiento del material, desde la temperatura de colada hasta la temperatura ambiente, se producen dos cambios de fase fundamentales: la solidificación del eutéctico y la transformación eutectoide (sólido-sólido). Cada una de ellas se desarrolla mediante procesos de nucleación y crecimiento de fases, esto ocasiona que la aparición de ferrita y/o perlita en la transformación sólido-sólido produzca la desaparición de la fase austenita originada en la solidificación. Esto dificulta notablemente la investigación del mecanismo y de los resultados de la solidificación y hace necesario el desarrollo de técnicas especiales para su estudio [7,61,62,79]. Estas dificultades son, muy probablemente, las causantes de que aún hoy existan discusiones sobre cuál es el verdadero desarrollo del proceso de solidificación de la fundición dúctil.

Es sabido que las propiedades mecánicas del material se relacionan directamente con la microestructura final del mismo [13,36,62], que se obtiene después de la última transformación de fase, cuando la pieza ya alcanzó la temperatura ambiente. Sin embargo, el proceso de solidificación también tiene una gran importancia en las características físicas de la fundición, ya que condiciona la transformación eutectoide posterior a través de factores tales como las microsegregaciones, el tamaño y morfología de los granos, etc. [1,5,62,66,67,69], de aquí el gran interés por comprender mejor y lograr la correcta simulación del proceso de solidificación.

## 1.2. OBJETIVO

En esta tesis se trata el problema de la solidificación equiaxial de la fundición dúctil de composición eutéctica. El principal objetivo del trabajo es el desarrollo de un modelo microestructural que permita la simulación del mencionado proceso. Las características principales que se desea que tenga el modelo son:

- Responder a la teoría plurinodular de solidificación.
- Simular la nucleación de los nódulos de grafito y la nucleación de los granos austenita de manera independiente una de otra.
- Simular los crecimientos dendrítico de la austenita y esférico del grafito, basados en la difusión del soluto.
- Respetar la conservación de masa del soluto.
- Posibilitar su acoplamiento a la resolución de la ecuación de conducción del calor a nivel macroscópico.
- Permitir determinar el tamaño y la densidad de grano.
- Permitir determinar la distribución del tamaño de los nódulos de grafito.
- Posibilitar la determinación de la evolución de la temperatura y de las fracciones de líquido, austenita y grafito.



Otros propósitos de esta tesis son:

- la validación del modelo mediante la comparación de sus resultados con mediciones y registros experimentales.
- La comparación de los resultados obtenidos mediante el modelo propuesto con los producidos por otros modelos, de manera de poder extraer conclusiones que contribuyan a una mejor comprensión del proceso de solidificación de la fundición nodular.

### I.3. CONTENIDO

En el Capítulo II de la presente tesis se presentan algunos conceptos metalúrgicos básicos sobre la solidificación de aleaciones en general y sobre la fundición dúctil en particular. Se exponen, además, las dos principales teorías de solidificación de este material sostenidas en la actualidad.

Una revisión de la literatura sobre la simulación numérica microestructural del proceso de solidificación de fundiciones de hierro con grafito esferoidal se detalla en el Capítulo III.

Los Capítulos IV y V contienen la implementación de dos modelos microestructurales basados en las principales hipótesis y ecuaciones presentadas por Su *et al.* [74] (teoría uninodular) y por Boeri [6] (teoría plurinodular). Dichos modelos se acoplan a un programa de elementos finitos que resuelve la ecuación de la energía a nivel macroscópico. En cada uno de los mencionados capítulos, se presenta un análisis de sensibilidad del modelo correspondiente.

En el Capítulo VI, se incursiona en la técnica de autómatas celulares para representar la solidificación de la fundición dúctil según la teoría uninodular. En este caso el micromodelo no se acopla con el nivel macroscópico y se toma una curva de enfriamiento obtenida con otro modelo como base para definir la evolución de la temperatura.

El modelo microestructural que se propone en esta tesis se expone en el Capítulo VII, en él se detallan las hipótesis realizadas y las leyes de nucleación y de crecimiento utilizadas. Algunos desarrollos que, por su longitud, harían incómoda la lectura del capítulo se han detallado en los Apéndices I y II.

El Capítulo VIII contiene el análisis de sensibilidad del nuevo modelo. Muestra el comportamiento de variables tales como la temperatura y las fracciones de líquido, austenita y grafito frente al cambio de los parámetros de nucleación y de la velocidad de enfriamiento.

El Capítulo IX está dedicado a la validación del nuevo modelo y a su comparación con los modelos implementados en los Capítulos IV y V. Los resultados numéricos son comparados con resultados experimentales obtenidos de la Ref. [6].

Finalmente el capítulo X está dedicado a las conclusiones extraídas de este trabajo y a la propuesta de posibles líneas de investigación futuras.



## *CAPÍTULO II*

# **CONCEPTOS METALÚRGICOS SOBRE SOLIDIFICACIÓN Y FUNDICIONES DE HIERRO**

### **II.1. INTRODUCCIÓN**

En este capítulo se presentan, en la Sección II.2., algunos conceptos metalúrgicos propios de la solidificación de las aleaciones en general. En las Secciones II.3. y II.4. se describen las características principales de la fundición de hierro en general y de la fundición de grafito esferoidal en particular respectivamente. El desarrollo de las Secciones II.2., II.3. y II.4. está basado esencialmente en las Referencias [2,11,22,29,41,60,77], cuya consulta se recomienda si se desea profundizar en los conceptos. Las teorías explicativas del proceso de solidificación de la fundición nodular se exponen en la Sección II.5.

### **II.2. SOLIDIFICACIÓN DE METALES Y ALEACIONES**

#### **II.2.1. Microestructura de los metales y aleaciones metálicas**

*Metales puros:*

Aunque los diferentes metales poseen propiedades muy diversas unos de otros, concuerdan en algunos aspectos característicos tales como altos calores específicos, buena conductividad térmica y eléctrica, alta densidad y capacidad de deformarse ampliamente y con carácter permanente sin rotura.

La mayoría de las propiedades características de los metales se deben a una configuración especial de sus átomos. Los metales no están formados por una masa de sustancia homogénea y continua, sino que existe una arquitectura o estructura por la que toda la masa metálica está formada por un conjunto de partículas o granos íntimamente unidos entre sí. Estos granos son de diversos tamaños y formas irregulares, aproximadamente equiaxiales y unidos por finos contornos, ver Figura II-1. A pesar de que todos los granos están formados por un mismo material, pueden distinguirse unos de otros debido a que cada grano posee a su vez una estructura o arquitectura propia, en la que los átomos tienen una ordenación espacial geométrica que es característica de cada metal. Los metales poseen carácter cristalino, es decir una ordenación espacial atómica que los caracteriza. Los granos de un metal están formados por átomos idénticos y ordenaciones geométricas iguales, sólo se diferencian unos de otros por la diferente orientación de las agrupaciones atómicas que los constituyen.

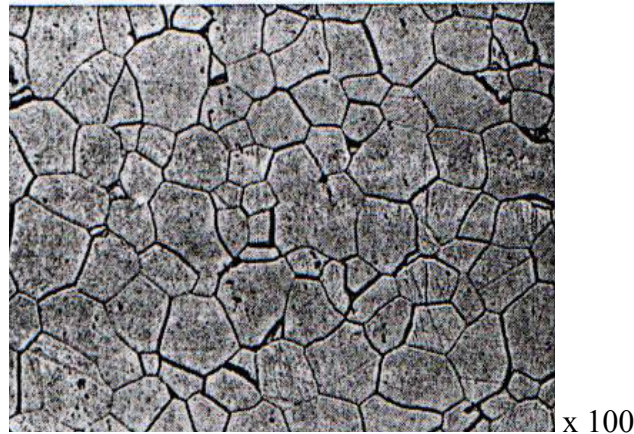


Figura II-1: Granos equiaxiales de ferrita. Ataque Nital 1%  
(foto extraída de Ref. [11] )

En la Figura II-2 pueden verse dos tipos de ordenamiento atómico que se presentan en el hierro: red cúbica de cara centrada para el hierro  $\gamma$  (Figura II-2 (a)) y red cúbica de cuerpo centrado para el hierro  $\alpha$  (Figura II-2 (b)). Por lo tanto, en los metales debemos considerar dos tipos de estructuras: la denominada granular, que nos revela la forma y agrupación de los granos que constituyen el metal (que depende del proceso de obtención), y la cristalina, que nos indica cómo se ordenan los átomos en cada grano cristalino (que es propiedad de cada metal).

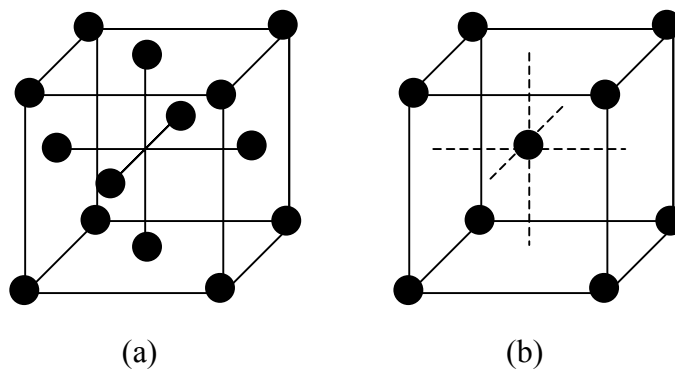


Figura II-2: (a) Red cúbica de cara centrada. (b) Red cúbica de cuerpo centrado

#### *Aleaciones metálicas:*

Una de las más importantes particularidades de los metales, es la facultad de unirse con otros metales o con sustancias no metálicas, dando un producto que conserva el carácter metálico. Se obtienen así materiales con mejores propiedades que las del metal base. Evidentemente es necesario que el producto de la unión posea un cierto grado de homogeneidad lo que exige obtener las aleaciones por fusión de los componentes y que éstos formen una solución en estado líquido, ya que así puede lograrse una íntima mezcla

de los mismos que más o menos subsistirá al solidificar. En la solidificación se pueden dar tres casos:

1. Los elementos conservan la solubilidad en estado sólido dando origen a una solución sólida en la que la estructura cristalina es la del metal base pero conteniendo átomos de los restantes componentes.
2. La solubilidad desaparece al solidificar, por lo que existen granos de cada componente que, si bien estarán íntimamente mezclados, mantendrán el ordenamiento atómico del elemento correspondiente. Los granos difieren en su orientación pero también en su naturaleza.
3. Los componentes reaccionan entre sí y forman un compuesto químico. Los compuestos químicos exigen proporciones definidas de los componentes, por lo que la aleación quedará constituida por granos de compuesto químico y otros del componente en exceso. Los compuestos químicos son también cristalinos pero sus redes espaciales difieren de la de los componentes. Los compuestos químicos no tienen carácter metálico por lo que pueden formar parte de una aleación pero no constituirlos por sí solos.

De lo dicho anteriormente se deduce que en las aleaciones pueden presentarse tres tipos de constituyentes: soluciones sólidas, metales puros y compuestos químicos. Asimismo pueden estar constituidas por un solo constituyente o por varios. En el primer caso, éste tendrá que ser una solución sólida. En el segundo podrán ser distintas combinaciones de los tres tipos de constituyentes. Cuando una aleación está constituida por más de un constituyente, por ser insoluble el uno en el otro, es frecuente que se forme una eutéctica entre ellos. La eutéctica está formada por la mezcla de pequeñísimos cristales de dos (o más) constituyentes insolubles entre sí entremezclados y tiene dos particularidades: que contiene proporciones constantes de ambos constituyentes y que funde a más baja temperatura que ambos.

Al igual que en los metales puros en las aleaciones podemos considerar la estructura granular, formada por la reunión de los granos constituyentes de la aleación, y la cristalina, que en este caso vendrá representada por las redes espaciales de cada constituyente. Los eutécticos, aunque pueden considerarse como un constituyente de las aleaciones, no forman en realidad un grano, ya que están a su vez formadas por multitud de minúsculos granos entremezclados de sus constituyentes.

Tanto en los metales puros como en las aleaciones el tamaño de grano depende de la velocidad de enfriamiento en el proceso de solidificación. Un enfriamiento rápido conduce a una estructura fina y uno lento a una estructura gruesa.

### **II.2.2. Transformación de fase**

Básicamente todas las transformaciones de fase se presentan por una nucleación y por el crecimiento de los núcleos, estando la velocidad de la transformación controlada por tales procesos.

La nucleación de una nueva fase puede darse de dos maneras:

- Nucleación heterogénea: la nueva fase se forma en alguna discontinuidad de la fase matriz, tal como una dislocación o un límite de grano.

- Nucleación homogénea: la nueva fase se forma dentro de una región uniforme de la fase madre.

Durante el proceso de solidificación el cambio de energía libre que se produce cuando el volumen pasa de estado líquido a sólido es

$$\Delta G_V = G_s - G_l \quad (\text{II-1})$$

siendo  $G_s$  y  $G_l$  las energías libre de Gibbs para el estado sólido y el estado líquido respectivamente y  $\Delta G_V$  el cambio de energía libre del volumen que cambia de estado.

En la Figura II-3 se puede ver la variación de la energía libre para ambos estados en función de la temperatura. Cuando la temperatura está por debajo de la temperatura de fusión, la variación de energía se hace negativa y la fase estable es la fase sólida, lo contrario ocurre para temperaturas por encima de la temperatura de fusión. Cuando  $T = T_{\text{fusion}}$  ambos estados tienen la misma energía libre y están en equilibrio termodinámico.

Puede ocurrir que una sustancia se mantenga líquida aún estando por debajo de la temperatura de equilibrio una cierta cantidad  $\Delta T$  a la que se le llama sobreenfriamiento. Esto sucede porque para que el cambio de fase se inicie se debe producir la nucleación y hay una energía libre asociada a la superficie del núcleo que actúa como barrera para que se inicie el proceso.

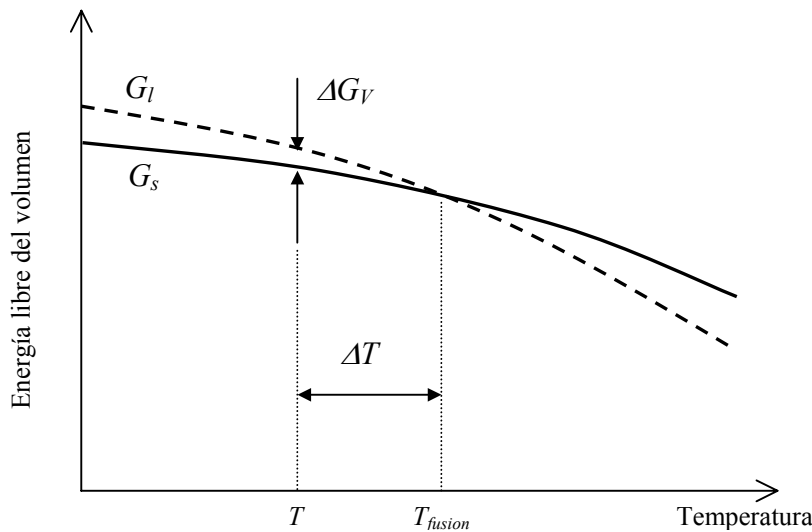


Figura II-3: Energía libre del volumen para las fases líquido y sólido en función de la temperatura.

Para tomar en cuenta el efecto superficial, el cambio de energía libre para formar un núcleo se escribe como

$$\Delta G = \frac{4}{3} \pi r^3 \Delta G_V + 4 \pi r^2 \gamma \quad (\text{II-2})$$

Donde la energía libre superficial se ha tomado directamente como la tensión superficial  $\gamma$  (lo que introduce un pequeño error para las aleaciones [77]).

Los dos términos de la ecuación (II-2) se grafican, para una determinada temperatura, en la Figura II-4 en la que se ve que el cambio de energía libre total tiene un máximo para  $r^*$  llamado radio crítico.

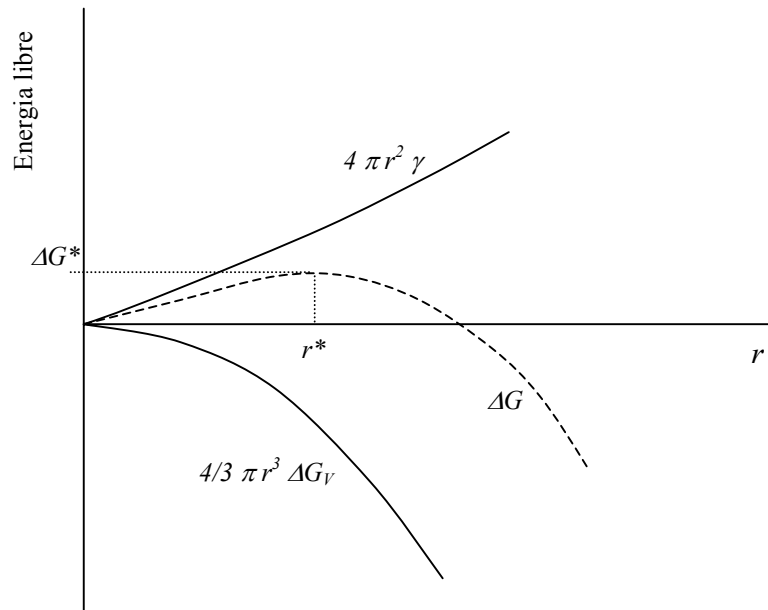


Figura II-4: Energía libre de formación de un núcleo en función de su radio.

En una nucleación real se cree que existe una distribución de tamaños de pequeños aglomerados de átomos en el líquido en cualquier tiempo y estos aglomerados se consideran como núcleos potenciales. Debido a fluctuaciones térmicas, dichos aglomerados ganan y pierden átomos continuamente. El fenómeno de nucleación se presenta cuando uno de estos aglomerados gana más átomos de los que pierde. Si cuando un aglomerado gana un átomo el cambio de energía libre es negativo, entonces se favorece el fenómeno de nucleación. Observando la Figura II-4 se ve claramente que para que esto ocurra, el radio del aglomerado debe ser el radio crítico. El radio crítico depende del sobreenfriamiento, cuando éste aumenta  $r^*$  disminuye.

Una forma en que la energía libre superficial que se requiere para la nucleación se vea reducida es que ésta se desarrolle sobre una intercara preexistente, que puede estar dada por las paredes del molde o por impurezas presentes en el líquido. Cuando esto ocurre la nucleación se denomina heterogénea y ésta, evidentemente, requiere de grados de sobreenfriamiento menores que la nucleación homogénea. La nucleación de los metales y aleaciones de producciones industriales siempre es heterogénea. En general se agregan inoculantes apropiados para incrementar la velocidad de nucleación.

El mecanismo exacto por medio del cual los inoculantes aseguran la nucleación se desconoce, y los inoculantes más efectivos se determinan por métodos de prueba y error.

### II.2.3. Solidificación de aleaciones. Difusión

Cuando una aleación solidifica, el sólido que se va formando lo hace con una composición diferente a la del líquido. De esta manera el soluto va sufriendo una redistribución que generalmente se conoce con el nombre de segregación.

Una forma sencilla de ejemplificar este fenómeno es mediante el análisis del proceso de solidificación con frente plano de una aleación de una sola fase.

Es importante destacar que, aún cuando en el líquido y en el sólido exista un elevado gradiente de concentración, se supone equilibrio en la intercara (dado por el diagrama de equilibrio correspondiente) durante todo el crecimiento.

*Solidificación de equilibrio:*

El diagrama de la Figura II-5 indica qué composiciones tendrán el líquido y el sólido en equilibrio para distintas temperaturas.

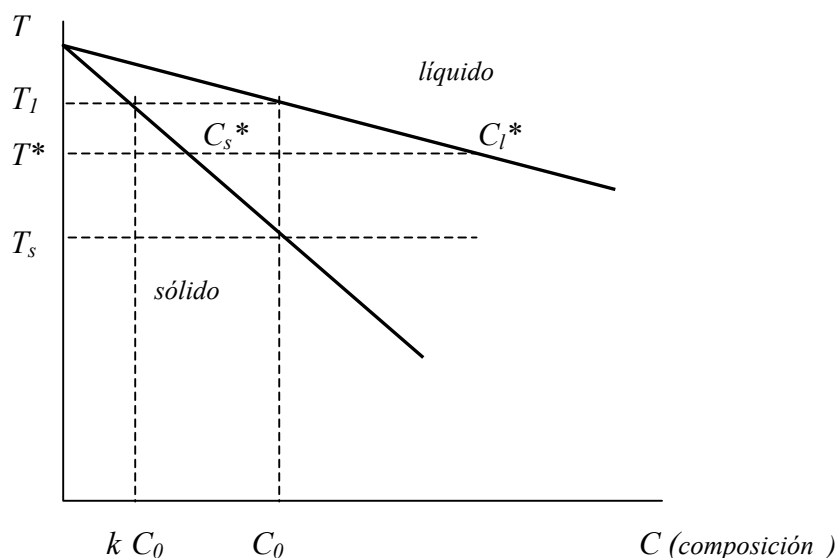


Figura II-5: Diagrama de fase.

El coeficiente de partición o de distribución de equilibrio  $k$ , que si las líneas de líquidos y de sólidos se consideran rectas es una constante independiente de la composición, es la relación entre las composiciones de equilibrio del sólido y del líquido.

$$k = \frac{C_s^*}{C_l^*} \quad (\text{II-3})$$

Si una aleación de composición  $C_0$  en estado líquido disminuye su temperatura, al llegar a  $T_l$  comenzará a solidificar y el primer sólido que se produzca tendrá una



composición  $kC_0$ . Si el proceso de solidificación es lo suficientemente lento como para mantener el equilibrio a cada instante entonces, cuando la temperatura alcance el valor  $T^*$ , se puede determinar la fracción de líquido en peso aplicando la conocida regla de la palanca

$$f_l = \frac{C_0 - C_s^*}{C_l^* - C_s^*} \quad (\text{II-4})$$

Al aplicar la regla de la palanca se supone que todo el líquido es de composición  $C_l^*$  y todo el sólido de composición  $C_s^*$ . Si se considera la solidificación de un cilindro al cual se le extrae calor por uno de sus extremos, el perfil de concentraciones a lo largo del mismo para un cierto tiempo  $t$  se vería como lo muestra la Figura II-6. Esto ocurre muy difícilmente en la realidad, ya que implica que el tiempo de solidificación sea lo suficientemente lento como para permitir que el soluto adquiera, por difusión, una distribución uniforme en cada fase.

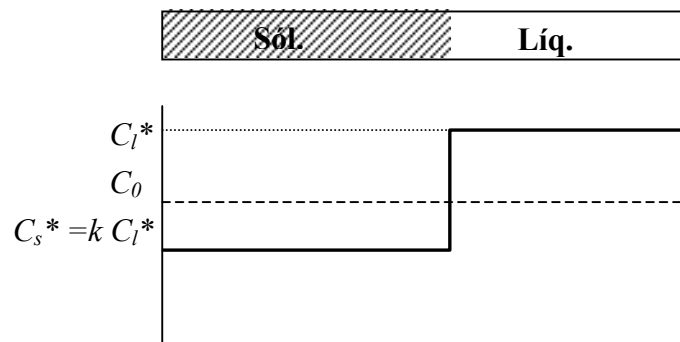


Figura II-6: Perfil de concentración para una solidificación de equilibrio de frente plano.

#### *Solidificación de no equilibrio con frente de solidificación plano*

Normalmente los procesos de solidificación se desarrollan a velocidades que no permiten que las fases de sólido y líquido alcancen composiciones uniformes. Desde un punto de vista teórico y con el fin de simplificar el análisis se pueden considerar situaciones que, sin ser reales, se acercan más que la solidificación de equilibrio a lo que verdaderamente ocurre.

Sin difusión en el sólido y composición uniforme en el líquido. Esta es una condición de mayor interés práctico que la de solidificación de equilibrio. En este caso la primera cantidad de sólido que se forme, a la temperatura  $T_l$  tendrá una composición  $kC_0$ , pero, a medida que la solidificación vaya avanzando, el líquido se verá enriquecido en soluto (si  $k < 1$ ) y por lo tanto el sólido que se irá formando de él también. Dado que no hay difusión en el estado sólido, éste irá presentado un perfil en el que se produce un aumento de concentración hacia el final de la solidificación como puede verse en la Figura II-7.

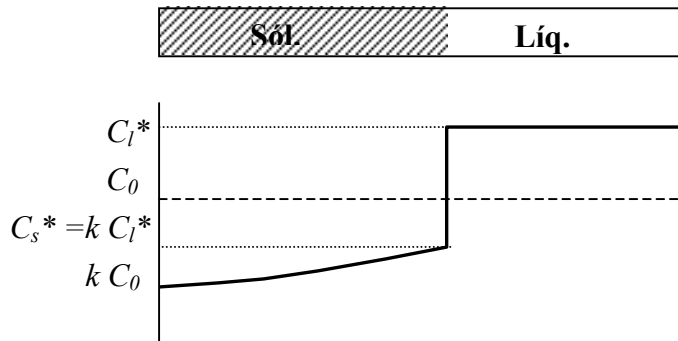


Figura II-7: Perfil de concentraciones en una solidificación de frente plano sin difusión en el sólido y con composición uniforme en el líquido.

La composición  $C_s^*$  para este caso viene dada por la ecuación siguiente

$$C_s^* = kC_0(1 - f_s)^{(k-1)} \quad (\text{II-5})$$

y la composición del líquido queda expresada como

$$C_l^* = C_0 f_l^{(k-1)} \quad (\text{II-6})$$

La ecuación ( II-6) es frecuentemente llamada ecuación de Scheil.

Sin difusión en el sólido y mezcla en el líquido. Durante el proceso de solidificación, si  $k < 1$ , el soluto es rechazado del sólido hacia el líquido en la intercara. Hay dos mecanismos de transporte disponibles para mezclar este soluto en el líquido: difusión del soluto y flujo del fluido (convección). De los dos la difusión es un mecanismo mucho más lento. Dado que en la capa límite de la intercara no puede haber transporte convectivo normal a la misma, en esta zona sólo puede actuar el lento mecanismo de la difusión, por lo tanto se produce una acumulación de soluto en la capa límite como puede verse en línea entrecortada en la Figura II-8.  $C_l$  es la composición del líquido más allá de la capa límite en donde actúa la convección.

Desde el comienzo del proceso, el soluto, que está siendo rechazado desde el sólido, va incrementando la concentración en la capa límite, pero esto ocasiona a su vez que el gradiente de concentración en dicha capa límite aumente y produzca así un aumento en el transporte por difusión a través de la misma. Finalmente, se alcanza un equilibrio entre el soluto que entra y el que sale de la zona límite y se detiene el incremento de la concentración en la misma, estableciéndose una relación constante entre la composición del líquido en la intercara  $C_l^*$  y la del líquido fuera de la capa límite  $C_l$ .

Es útil definir un coeficiente  $k_e$  llamado de distribución efectiva que relaciona las composiciones del sólido en la intercara  $C_s^*$  con la del líquido fuera de la capa límite  $C_l$

cuando se produce una solidificación de no equilibrio. Después de completarse el transitorio inicial el valor de  $k_e$  es constante.

$k_e$  dice mucho del efecto de la mezcla del líquido sobre el perfil de soluto que solidifica hacia el sólido. Ver Figura II-9. Los dos casos límites son cuando  $k_e = 1$  y cuando  $k_e = k_0$ .

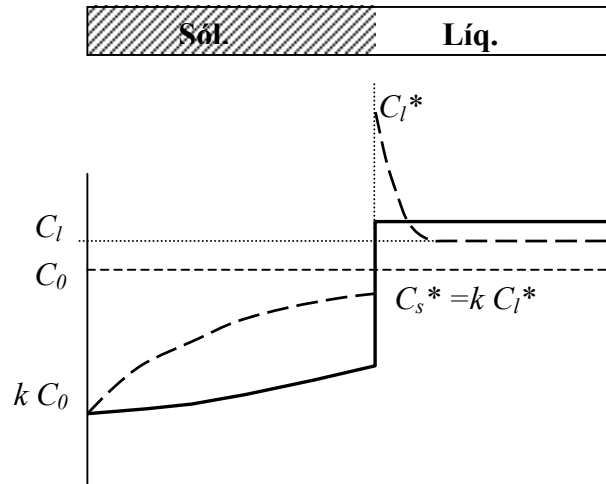


Figura II-8: Perfil de concentración con el efecto de acumulación en el líquido.

#### Estructuras granulares:

La Figura II-10 presenta un aspecto esquemático general del tipo de estructuras obtenidas en un lingote. En general pueden distinguirse tres zonas. En la zona de contacto con el molde la velocidad de enfriamiento es alta debido a la temperatura inicial del mismo. Se produce entonces un gran sobreenfriamiento que ocasiona la nucleación de numerosos pequeños granos con orientaciones aleatorias, formándose de esta manera una zona equiaxial externa. Estos granos rápidamente adquieren un crecimiento dendrítico y desarrollan ramas en las direcciones cristalográficas preferenciales, se establece entonces un crecimiento competitivo entre las distintas orientaciones de los granos de la zona equiaxial produciéndose un predominio de aquellas ramas orientadas en forma paralela y opuesta al flujo de calor, formándose así la zona columnar intermedia. Existe además otra zona equiaxial que se forma en el centro del lingote y que es principalmente el resultado del crecimiento de ramas dendríticas que se desprendieron de los granos existentes y que crecen independientemente en el líquido central levemente sobreenfriado.

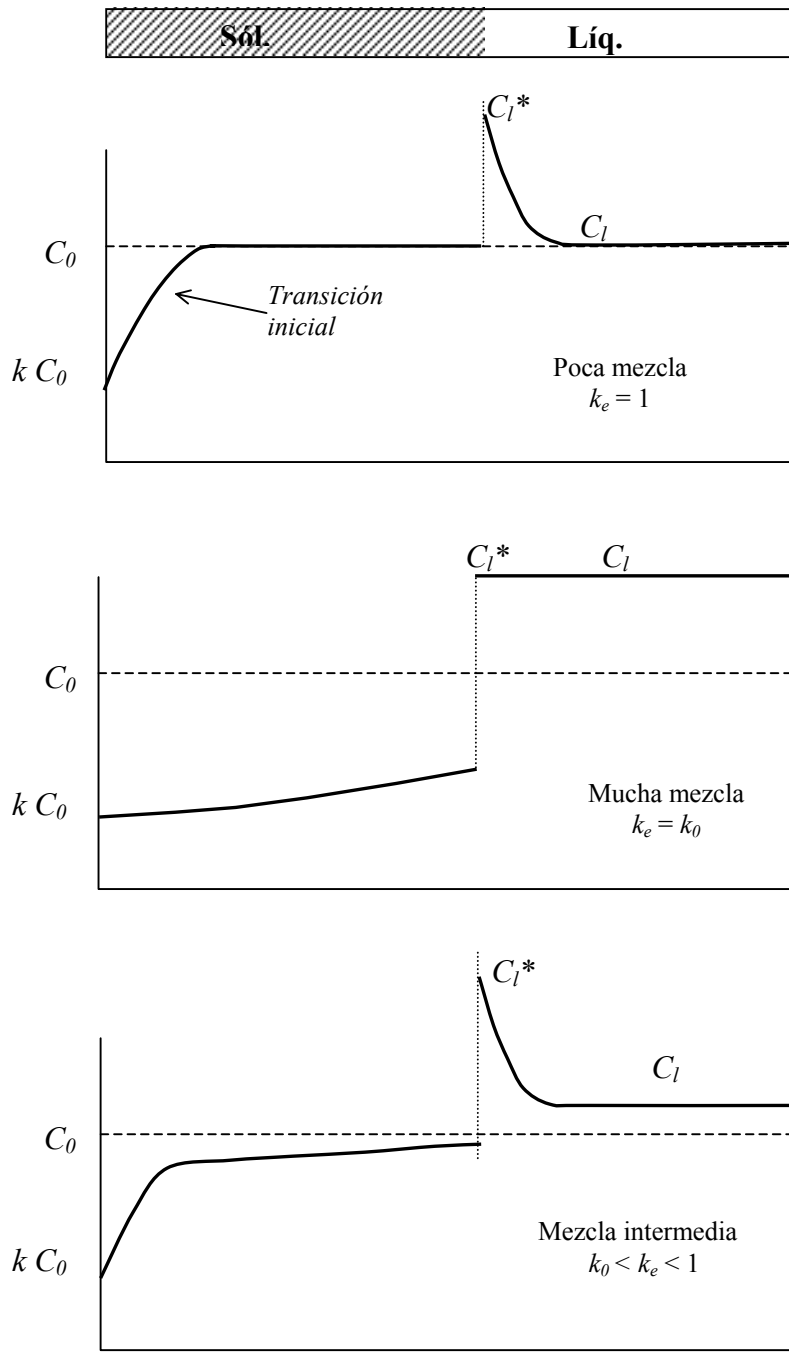


Figura II-9: Perfiles de distribución de soluto para diferentes valores del coeficiente de distribución efectiva.

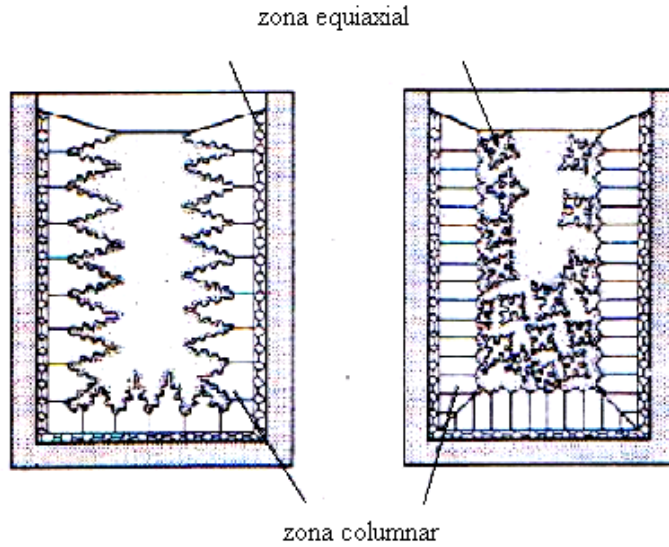


Figura II-10: Estructura de tres zonas de un lingote (Figura extraída de la Ref. [41]).

En la Figura II-11 (a) se muestra un desarrollo columnar dendrítico y en la Figura II-11 (b) uno equiaxial dendrítico para una aleación. En ambos esquemas se muestra además el perfil de temperaturas. En el crecimiento columnar la parte más caliente del sistema es el líquido, mientras que en la solidificación equiaxial la mayor temperatura está en el cristal. De esto se deduce que el líquido debe estar siempre sobreenfriado para que se puedan desarrollar cristales equiaxiales. La inoculación promueve la solidificación equiaxial.

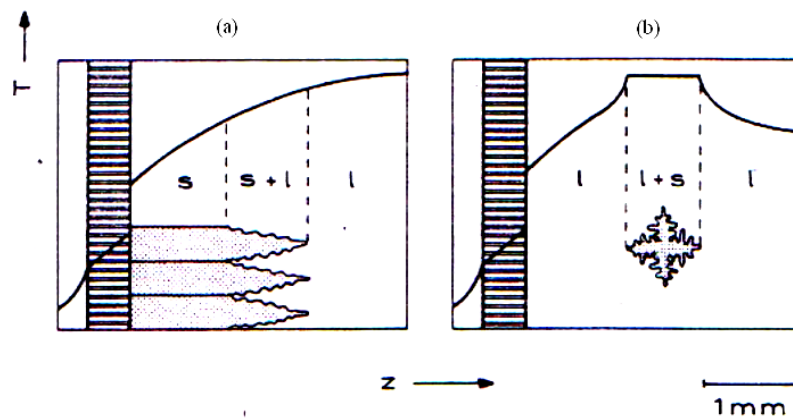


Figura II-11: Morfología de la intercara y distribución de la temperatura. (Figura extraída de la Ref. [41])

*Sobreenfriamiento constitucional:*

Las intercaras planas se vuelven inestables cuando existe un sobreenfriamiento al frente de las mismas y entonces se transforman en dendríticas, esto es válido tanto para los metales como para las aleaciones. Cuando el elemento que solidifica es un metal puro, la única manera de que ese sobreenfriamiento se produzca es con un gradiente negativo de la temperatura, sin embargo, cuando la sustancia es una aleación esto no es estrictamente necesario ya que el sobreenfriamiento puede ser de carácter constitucional. En las aleaciones, la temperatura de solidificación no es una constante, sino más bien una función de la composición dada por la línea líquidus del diagrama de fases. Debido a esto en las aleaciones se puede obtener un sobreenfriamiento frente a la intercara aún cuando el gradiente de temperatura sea positivo, tal como lo muestra la Figura II-12. En la parte de arriba de la Figura II-12 se ve un perfil de concentración de soluto en el sólido y en el líquido y abajo se muestra el perfil de temperatura  $T$  que se presenta en el sólido y el líquido y el perfil de temperaturas de inicio de la solidificación  $T_s$  que corresponde a cada nivel de concentración. La zona sombreada muestra la diferencia entre la temperatura a la que comenzaría la solidificación para cada concentración en el líquido y la temperatura real que hay en la aleación. La diferencia entre ambas se denomina sobreenfriamiento constitucional. Como puede verse, la aleación está sobreenfriada al frente de la intercara aún cuando el gradiente de temperatura es positivo.

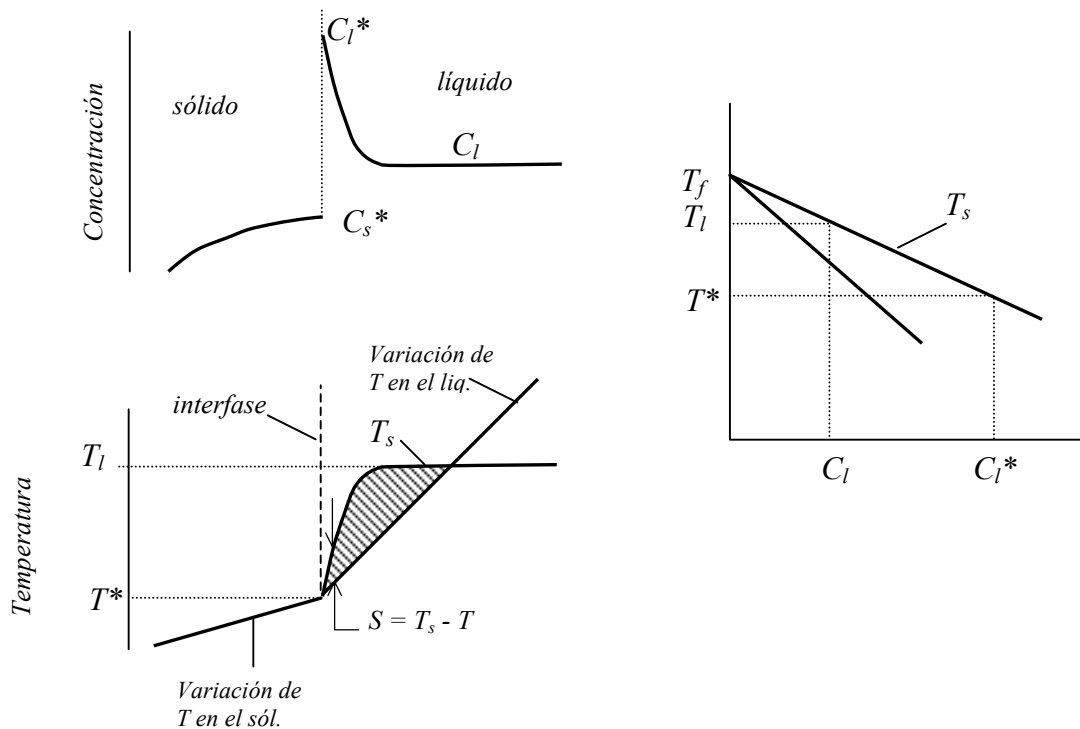


Figura II-12: Región sobreenfriada producida por la acumulación de soluto en la solidificación de una aleación con un gradiente de temperatura positivo.

### II.3. FUNDICIONES DE HIERRO

La Figura II-13 muestra el diagrama de equilibrio hierro-carbono. No se ha trazado el diagrama completo sino sólo la parte que corresponde a porcentajes de carbono (en peso) menores a 6,67 % que es el porcentaje correspondiente a la composición del compuesto intermetálico llamado cementita  $Fe_3C$ . La parte del diagrama correspondiente a porcentajes superiores al 6,67 % no tiene importancia comercial y normalmente no se considera.

Si se observa el diagrama se ve que todas las composiciones conteniendo menos de 2,06 % de carbono pasan a través de la región austenítica durante el enfriamiento. Las aleaciones en este intervalo son clasificadas como aceros, aunque en la práctica sólo en raras ocasiones los aceros superan el 1% de carbono. Las aleaciones con más del 2 % de carbono se clasifican como hierros fundidos o fundiciones. Es importante destacar que los hierros fundidos que se encuentran en el comercio no son simples aleaciones de hierro y carbono, sino que contienen cantidades relativamente grandes de otros elementos, el más predominante de los cuales es el silicio. Por esto en general los hierros fundidos son considerados aleaciones ternarias de hierro, carbono y silicio. La presencia de silicio promueve la formación del grafito, por lo tanto los hierros fundidos pueden contener carbono tanto en forma de grafito como de cementita. Los aceros sólo contienen carbono combinado en forma de cementita  $Fe_3C$ .

Hay cuatro tipos principales de fundiciones de hierro (aunque existen otras clasificaciones):

- a) *Fundición gris*: contiene la mayor parte del carbono bajo la forma de láminas de grafito cuya presencia es la causa de que estas fundiciones presenten una fractura gris. Presentan buena maquinabilidad, colabilidad y buena capacidad de amortiguamiento.
- b) *Fundición blanca*: la mayor parte del carbono se halla formando carburo de hierro o cementita y ésta es la causa de que presenten una fractura blanca. Son muy duras y poco dúctiles y con gran resistencia al desgaste y la abrasión.
- c) *Fundición maleable*: son fundiciones blancas que reciben un posterior tratamiento térmico para darles ductilidad.
- d) *Fundición nodular*: en ellas el grafito se presenta en esferas o nódulos. Sus propiedades presentan un puente entre las de la fundición gris y las del acero moldeado.

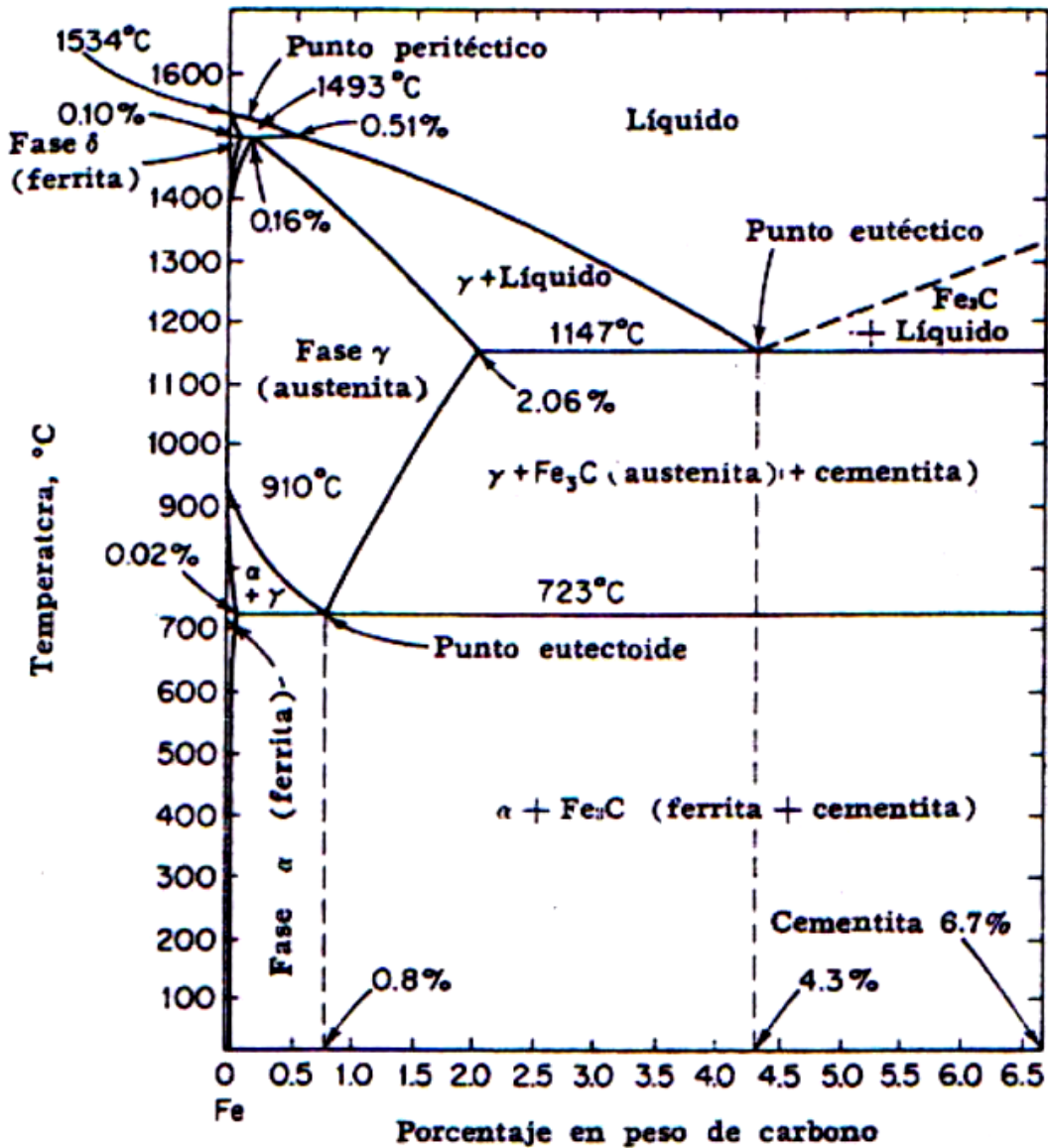


Figura II-13: Diagrama de fases hierro-carbono (extraído de Ref. [60]).

## II.4. FUNDICIÓN NODULAR

Como ya se mencionó, la fundición nodular es un tipo de fundición de hierro en la cual el grafito se presenta en forma de pequeñas esferas (Ver Figura II-14).

El cambio en la morfología del grafito, de laminar (fundición gris) a nodular, tiene una gran influencia sobre las propiedades mecánicas del material. Esta forma del grafito contribuye a disminuir los efectos de concentración de tensiones y la discontinuidad de la matriz metálica y por esta razón la fundición nodular es más resistente y más dúctil que la fundición gris. Por otro lado resulta más económica que la fundición maleable y que el



acero colado. La mayoría de las fundiciones dúctiles comerciales tienen propiedades dentro de los siguientes intervalos:

- Ductilidad: 2-30% elongación en 50 mm
- Tracción: 375-818 MPa
- Fluencia: 205-614 MPa

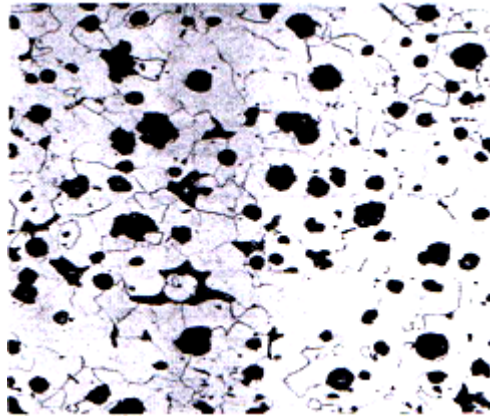


Figura II-14: microestructura de fundición dúctil. Ataque Nital 2%. x100.  
(foto extraída de Ref. [2] ).

La fundición nodular es utilizada en numerosas aplicaciones estructurales en las que se requiere resistencia y dureza pero a la vez buena maquinabilidad y bajo costo. La fundición dúctil admite tratamientos térmicos y aleaciones que mejoran sus propiedades, lo que permite un notable aumento de sus aplicaciones. En los últimos años ha despertado considerable interés el tratamiento térmico austempering (Austempered dúctil iron, ADI). Este tratamiento puede transformar las buenas propiedades de la fundición dúctil en propiedades superiores, por ejemplo se puede llegar a duplicar la resistencia obtenida “as cast” para igual ductilidad.

Los usos de la fundición de grafito esferoidal son innumerables, cadena dentadas, eslabones, engranajes, ruedas, poleas, etc. El mayor porcentaje de toneladas producidas se emplea en la fabricación de tuberías, también es muy utilizado en la industria automotriz, en cigüeñales, bielas, válvulas, discos de freno, masas de ruedas, horquillas de transmisión, etc.

Para la obtención de la fundición dúctil, la fusión del metal base, constituido por arrabio, chatarra de acero y retorno de fundición, puede hacerse en hornos de cubilote (que requiere controles más estrictos) o en hornos eléctricos (más limpios y fiables). La producción de fundición nodular requiere un estricto control metalúrgico para evitar la presencia de elementos inhibidores de la nodularización del grafito tales como titanio, arsénico, estaño y plomo.

El agregado de Ce o de Mg es capaz de producir que el grafito tome la forma esférica. En la actualidad, los compuestos nodulizantes más empleados en la industria son

los de Mg. Los fundidores han desarrollado diferentes métodos de adición del compuesto nodulizante, uno de ellos es la adición del mismo en la cuchara antes de que ésta reciba el material fundido. Finalmente se procede a la inoculación que consiste en el agregado al líquido de aleaciones de ferrosilicio, u otros inoculantes, con el objetivo principal de generar sitios de nucleación heterogénea. El proceso de inoculación es esencial para minimizar la presencia de carburos eutécticos y para controlar el tamaño, la distribución y la morfología de la fase grafito.

## II.5. TEORÍAS EXPLICATIVAS DEL PROCESO DE SOLIDIFICACIÓN DE LA FUNDICIÓN NODULAR

Los derechos de patente para la producción de la fundición de grafito esferoidal (SG), fueron otorgados a Adey en 1948 y a Millis Gagnebin y Pilling en 1949. Sin embargo puede decirse que el descubrimiento se realizó algunos años antes.

Tan pronto como se conoció que la estructura esferoidal del grafito podía obtenerse directamente durante la solidificación del mismo (“as-cast”) y sin necesidad de largos y costosos tratamientos térmicos posteriores a la solidificación de la fundición blanca, comenzaron los intentos por explicar su mecanismo de formación ya que comprenderlo en su totalidad permitiría tener un mayor control sobre el mismo y, de esa manera, sobre las propiedades físicas finales del producto.

Varias son las explicaciones del proceso que se propusieron a lo largo del tiempo [76], En años anteriores al descubrimiento, la fundición de grafito esferoidal se obtenía por descomposición de la cementita, por medio de tratamientos térmicos. Tal vez fue debido a esto que los primeros intentos de explicación de la formación del grafito esferoidal aún se basaban en dicha descomposición, es decir se sostenía que el proceso era principalmente un proceso en estado sólido. Posteriormente esa posibilidad fue totalmente descartada y se acepta sin discusión que la formación de la estructura nodular se produce durante la solidificación. Durante algún tiempo se negó la posibilidad de que la austenita eutéctica fuera de naturaleza dendrítica. Sin embargo, la presencia de dendritas de austenita, aún en composiciones eutécticas e hipereutécticas, viene siendo observada desde hace años, frente a este hecho algunos investigadores sostienen que la austenita eutéctica, al igual que la primaria es de naturaleza dendrítica [6,39,61,65,70,72]. Mientras que otros opinan que esa formación no corresponde a la verdadera austenita eutéctica, siendo ésta la que se forma como una esfera, encapsulando los nódulos de grafito. Dentro de esta segunda hipótesis la austenita dendrítica es llamada “off-eutectic” y se considera que puede producirse o no, dependiendo de las condiciones de solidificación [43,44].

Algunos investigadores clasifican las principales teorías sobre la solidificación de la fundición SG existentes en la actualidad en [69]:

- Teorías de carácter “uninodular”, en las que la unidad de solidificación está constituida por un nódulo de grafito y su correspondiente envoltura de austenita.
- Teorías de carácter “plurinodular”, en las que se considera que cada unidad de solidificación contiene numerosas esferas de grafito.

Las teorías explicativas de carácter uninodular (Ver Figura II-15) sostienen básicamente que:

1. Cuando la aleación alcanza la temperatura eutéctica los nódulos de grafito nuclean en el líquido.
2. Si bien los nódulos pueden crecer en contacto con el líquido, rápidamente son rodeados por una capa esférica de austenita.
3. A partir de que los nódulos son encapsulados crecen por difusión del carbono desde el líquido hacia el nódulo a través de la capa de austenita.
4. La cápsula de austenita continúa creciendo en forma esférica hasta que su desarrollo se ve limitado por la presencia de otros granos.

Esta forma de crecimiento del grafito resulta difícil de explicar teóricamente debido tanto a la lentitud del proceso de difusión del carbono a través de la austenita, como a las presiones que deberían generarse en la envoltura de austenita cuando la esfera de grafito va creciendo.

La teoría plurinodular (Ver Figura II-16) puede resumirse en los siguientes puntos [72]:

1. Las nucleaciones de la austenita y del grafito son independientes.
2. La austenita crece en forma dendrítica mientras que el grafito lo hace en forma esférica.
3. El grafito crece inicialmente en contacto con el líquido pero, al entrar en contacto con las dendritas de austenita, los nódulos son rodeados por ésta.
4. Una vez rodeados por la austenita las esferas de grafito crecen por difusión del carbono, desde el líquido, a través de la austenita.

Las principales diferencias entre las dos teorías mencionadas pueden resumirse según se muestra en el siguiente cuadro:

	TEORÍA UNINODULAR	TEORÍA PLURINODULAR
<b><i>Nucleación de la austenita</i></b>	La austenita eutéctica no tiene nucleación independiente y crece a partir de los nódulos de grafito.	La austenita eutéctica nuclea en el líquido en forma independiente.
<b><i>Crecimiento de la austenita</i></b>	La austenita crece en forma esférica alrededor de los nódulos de grafito.	La austenita crece en forma dendrítica y al entrar en contacto con los nódulos de grafito los envuelve.
<b><i>Unidad de solidificación</i></b>	La unidad de solidificación está constituida por un nódulo de grafito rodeado por una envoltura esférica de austenita.	La unidad de solidificación está constituida por un grano de austenita (de crecimiento dendrítico) y los nódulos de grafito que quedaron atrapados en él.

Si bien ahora la teoría plurinodular muestra un franco avance sobre la uninodular, no son muchas las propuestas realizadas para el tratamiento computacional de la misma, por el contrario sí son numerosos los modelos numéricos que tienen como objetivo la simulación de la solidificación de la fundición dúctil según la teoría uninodular [12,30,31,45,52,53,73]. Los análisis numéricos realizados basándose en el modelo plurinodular [6] simplifican el tratamiento del crecimiento dendrítico de la austenita.

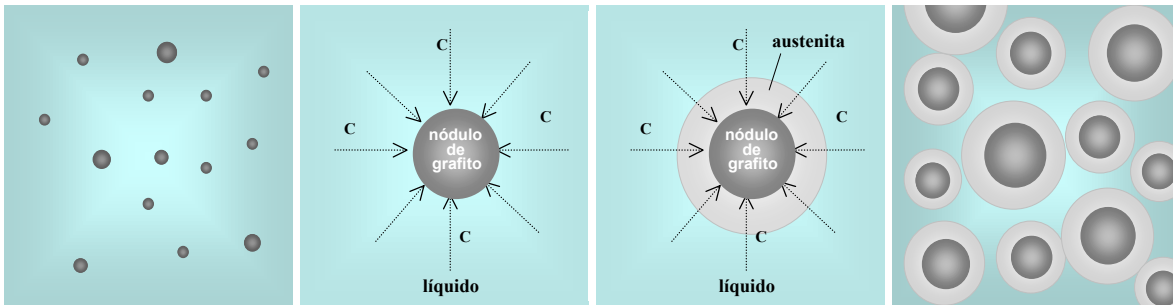


Figura II-15: Representación esquemática de los pasos de la teoría uninodular.

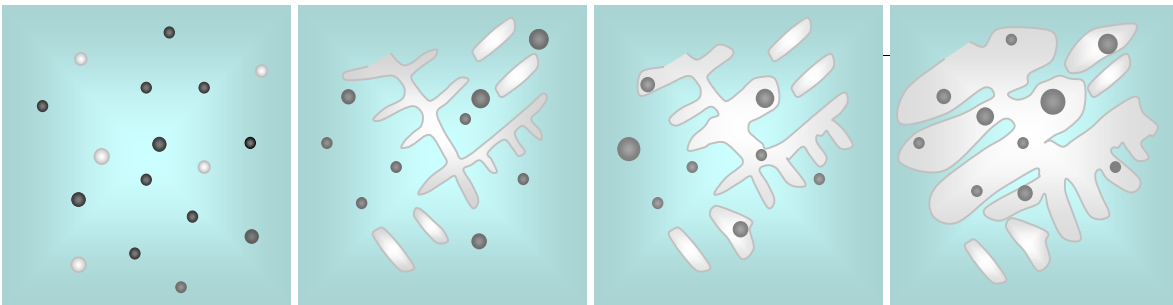


Figura II-16: Representación esquemática de los pasos de la teoría plurinodular.

En resumen, en este capítulo se han presentado los conceptos básicos necesarios para el tratamiento de solidificación en fundiciones de hierro. Sin embargo, el estado del arte en el modelado computacional aún no se ha discutido y ese es el tema del Capítulo III.

## CAPÍTULO III

# MODELOS PARA LA SOLIDIFICACIÓN DE LA FUNDICIÓN NODULAR: REVISIÓN BIBLIOGRÁFICA

### III.1. INTRODUCCIÓN

La estructura de un sólido y su comportamiento frente a los diversos procesos que sobre él se realicen puede analizarse a diferentes niveles [35,71]:

- Nivel de nano-mecánica (del orden de los nm): en esta escala el análisis se realiza a nivel de los átomos del material. El estudio del ordenamiento atómico de un cristal metálico, el análisis de las formas en que los átomos de un material saltan de la fase líquida a la sólida en un proceso de solidificación o de la evolución de una dislocación durante la deformación del material, son ejemplos de análisis a nivel de la nanomecánica. Si bien el número de átomos que pueden analizarse en los tratamientos computacionales realizados a esta escala crece en forma acelerada con la nueva tecnología de computadoras, no es posible aún simular una cantidad de átomos suficientemente amplia como para poder incluir más de un simple y aislado aspecto, tal como contorno de grano, dislocación, etc. Por ejemplo, para simular un micrón cúbico de un metal se deben simular del orden de  $10^{11}$  átomos.
- Nivel de micro-mecánica (del orden de  $\mu\text{m}$  a mm): el nivel microscópico es aquel que es posible observar con microscopios ópticos de 100 a 1000 aumentos. A esta escala es posible la observación de microfisuras, fases constitutivas del material, inclusiones, microsegregaciones, etc. A este nivel se realiza el tratamiento fenomenológico de los procesos de nucleación y crecimiento de los granos que se producen en los procesos de cambio de fase y que resultan determinantes de las propiedades físicas del material.
- Nivel de macro-mecánica (del orden de mm a m ): desde el nivel macroscópico es posible abarcar la totalidad del sólido o estructura analizada. A esta escala es factible por ejemplo el estudio de procesos térmicos analizados mediante la mecánica del continuo. Desde el punto de vista de las piezas obtenidas por fundición, a este nivel es posible abarcar defectos tales como macrosegregaciones, rechupes, deformaciones, defectos dimensionales, fisuras, etc., que están estrechamente relacionados con la calidad funcional de la pieza.

Hay muchos problemas que no pueden ser tratados con la profundidad y exactitud suficientes si no se emplea más de un nivel de análisis. Este es el caso del proceso de solidificación de una aleación. Actualmente en dicho proceso es normal que el análisis del transporte de calor y de masa (convección y macrosegregación) en la pieza se realice mediante la resolución de ecuaciones continuas a nivel macroscópico, pero se estudie además la evolución de la microestructura a través de leyes fenomenológicas que rigen la

nucleación y el crecimiento de las diferentes fases que intervienen en el proceso. Evidentemente, ambos niveles están estrechamente relacionados ya que la evolución de la microestructura depende de la temperatura y, por otro lado, el calor latente generado en la solidificación y que depende del aumento de la fracción sólida influye sobre la distribución y evolución de las temperaturas en la pieza. A tal punto es importante la influencia que la evolución de la microestructura durante la solidificación tiene sobre la forma de las curvas de enfriamiento, que en la práctica industrial es común el uso de registros de temperaturas realizados sobre muestras extraídas del material fundido listo para colar, con el fin de determinar, a partir de su observación y análisis, las características de la microestructura que se obtendrá. Esta técnica se ha ido perfeccionando y existen en la literatura numerosos trabajos sobre el tema Ref. [37,42,68,84].

Actualmente, la mayoría de los modelos numéricos que se desarrollan para la simulación de la solidificación de metales y aleaciones tienen en cuenta ambas escalas.

En la Figura III-1, cuyo diseño sumamente explicativo ha sido extraído de la Ref. [71], se observan esquemáticamente los distintos niveles desde los que se puede analizar la intercara líquido-sólido en un proceso de solidificación.

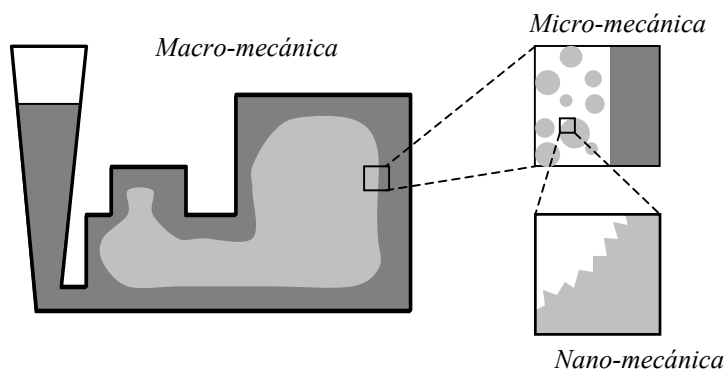


Figura III-1: Distintas escalas de análisis del proceso de solidificación (el diseño de esta figura ha sido extraído de la Ref. [71] ).

Actualmente se da un uso extendido del concepto de macro y micro-mecánica, relacionándolo con la existencia en un mismo problema de dimensiones que difieren en varios órdenes de magnitud [35].

Este capítulo contiene una revisión de la literatura sobre la simulación numérica del proceso de solidificación de fundiciones de hierro con grafito esferoidal, haciendo hincapié en los modelos de análisis a nivel micromecánico.

En la Sección III.2. se realiza una breve descripción del tratamiento macroscópico del proceso de solidificación de una aleación. En la Sección III.3. se resumen los aspectos más importantes de los modelos y simulaciones microestructurales desarrollados por otros autores para el caso de la solidificación de la fundición dúctil. Y en la Sección III.4. se presentan las conclusiones del estudio realizado.

### III.2. TRATAMIENTO MACROMECAÁNICO DE LA SOLIDIFICACIÓN

Las primeras simulaciones del proceso de solidificación fueron realizadas desde un punto de vista estrictamente macroscópico. La resolución numérica de la ecuación del calor permite seguir la posición de la intercara sólido-líquido en una pieza durante su enfriamiento [14,18,20,21]. Esto hace factible por ejemplo conocer las últimas zonas en solidificar, lo que permite inferir la posibilidad de macrosegregaciones y de rechupes. Si el cálculo macroestructural es además de carácter termo-mecánico [14,15,19], es posible también la simulación de deformaciones y tensiones residuales en la pieza. Si bien este tipo de análisis permite predecir algunos defectos macroscópicos que hacen a la calidad estructural de la pieza no es capaz de brindar información sobre las propiedades del material obtenido, información que sí es posible lograr mediante adecuadas simulaciones microestructurales. Por otra parte, las curvas de enfriamiento obtenidas por medio de análisis puramente macroestructurales se calculan con la liberación del calor latente según funciones simples, generalmente lineales, de la temperatura y esto hace que no sea posible la simulación del fenómeno de recalescencia.

Para considerar el enfriamiento de una pieza de fundición, si sólo se tiene en cuenta la propagación del calor por conducción, se puede expresar la ecuación de la energía de la siguiente forma:

$$\rho c \dot{T} = \nabla \cdot (k \cdot \nabla T) \quad (\text{III-1})$$

siendo  $\rho$  la densidad,  $c$  el calor específico,  $k$  la conductividad,  $T$  la temperatura y  $\nabla$  el operador gradiente, mientras que el punto sobre una variable indica derivada temporal. Para esta ecuación deben considerarse además las correspondientes condiciones iniciales y de contorno.

Si el proceso de enfriamiento está acompañado de fenómenos de cambio de fase, es preciso agregar un término a la ecuación (III-1) de manera que se obtiene

$$\rho c \dot{T} + \rho L \dot{f}_{pc} = \nabla \cdot (k \cdot \nabla T) \quad (\text{III-2})$$

donde  $L$  es el calor latente específico correspondiente al cambio de fase y  $f_{pc}$  es la función de cambio de fase ( $0 \leq f_{pc} \leq 1$ ).

Para el caso del proceso de solidificación, la función de cambio de fase  $f_{pc}$  viene dada por  $1-f_s$ , siendo  $f_s$  la fracción sólida. En el análisis puramente macroscópico del cambio de fase,  $f_{pc}$  es una función explícita de la temperatura (ver Figura III-2), siendo esta última la única variable de estado independiente del problema. Para este caso es posible reemplazar

$$\dot{f}_{pc} \quad \text{por} \quad \frac{\partial f_{pc}}{\partial T} \dot{T}$$

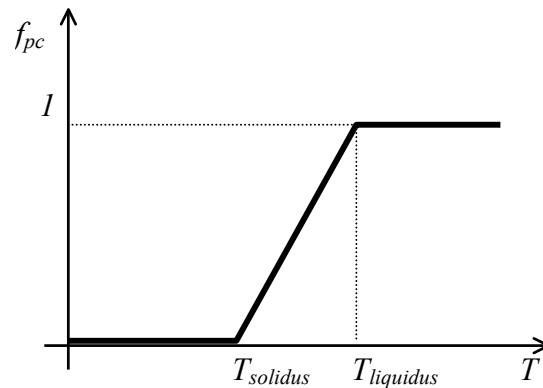


Figura III-2: Función de cambio de fase para un caso no isotérmico.

La ecuación ( III-2), sólo pueden resolverse analíticamente para casos muy simples, para problemas más complejos se hace necesario el empleo de métodos numéricos. En su resolución espacial han sido empleados métodos tales como diferencias finitas, elementos finitos, elementos de contorno y volúmenes finitos. La discretización temporal en general se trata mediante el método de las diferencias finitas.

Los métodos de resolución a nivel macroscópico del fenómeno de solidificación pueden ser divididos en dos grandes grupos [14,55]:

- los métodos de seguimiento del contorno móvil (intercara sólido-líquido) o métodos de dos dominios, en los que el sólido y el líquido son considerados dos medios diferentes y sobre cada uno de ellos se aplica una ecuación continua. Son más usados para tratamiento de la solidificación de sustancias puras.
- los métodos de dominio fijo o de un solo dominio, en los que el sólido y el líquido constituyen un único dominio y en cada punto de la malla se considera un promedio de las fases existentes. Este método es más adecuado para problemas de solidificación de aleaciones, que presentan zonas pastosas.

Dentro de los dos grandes grupos mencionados existen a su vez diversos modelos implementados . Ver Ref. [14,55].

La resolución de la ecuación ( III-2) por el método de los elementos finitos requiere una subdivisión del dominio en elementos macroscópicos tales que en ellos las variables de interés se comporten como funciones suaves que puedan aproximarse mediante polinomios de bajo orden. Para la integración de dichas funciones en cada elemento se emplean los puntos de integración de Gauss y las propiedades utilizadas se consideran representativas de las del entorno de esos puntos. Estas propiedades pueden ser resultado de procesos microestructurales que requieren su propio análisis y, en algunos casos, la elección de un nuevo elemento de volumen representativo a nivel microscópico [35].



### III.3. MODELOS MICROESTRUCTURALES DE SOLIDIFICACIÓN

Como ya se dijo, los análisis a nivel puramente macromecánico no pueden predecir parámetros microestructurales tales como tamaño de grano, espaciamiento eutéctico o dendrítico y tipo y porcentajes de fases, todos de gran influencia en las propiedades mecánicas del material. Estos aspectos sólo pueden estudiarse a través de la formulación de un modelo microscópico.

En el proceso de solidificación, los dos tipos de modelos micromecánicos más empleados para la obtención de la microestructura del sólido son:

- La simulación por autómatas celulares (AC), que consiste en la subdivisión del dominio elegido en una cuadrícula de celdas de tamaño regular que almacenan información y sobre las cuales se aplican determinadas reglas. En este tipo de análisis se suelen combinar leyes determinísticas y probabilísticas. Este método permite visualizar la microestructura y hace posible la comparación cualitativa directa con micrografías obtenidas de la pieza o probeta. La mayor parte de los trabajos que utilizan esta técnica para el tratamiento de la solidificación, lo hacen para la simulación del crecimiento dendrítico [33,34,54,56]. No se encontró en la bibliografía consultada modelos de AC para la solidificación de la fundición dúctil.
- La aplicación de leyes fenomenológicas de carácter determinístico sobre volúmenes microscópicos representativos que, en general, están constituidos por un grano. En este caso se trabaja con promedios y porcentajes y no se puede visualizar directamente el aspecto de la microestructura.

En la Figura III-3 se representa en forma esquemática la discretización de la pieza y los volúmenes representativos a nivel microscópico para las dos formas de resolución mencionadas.

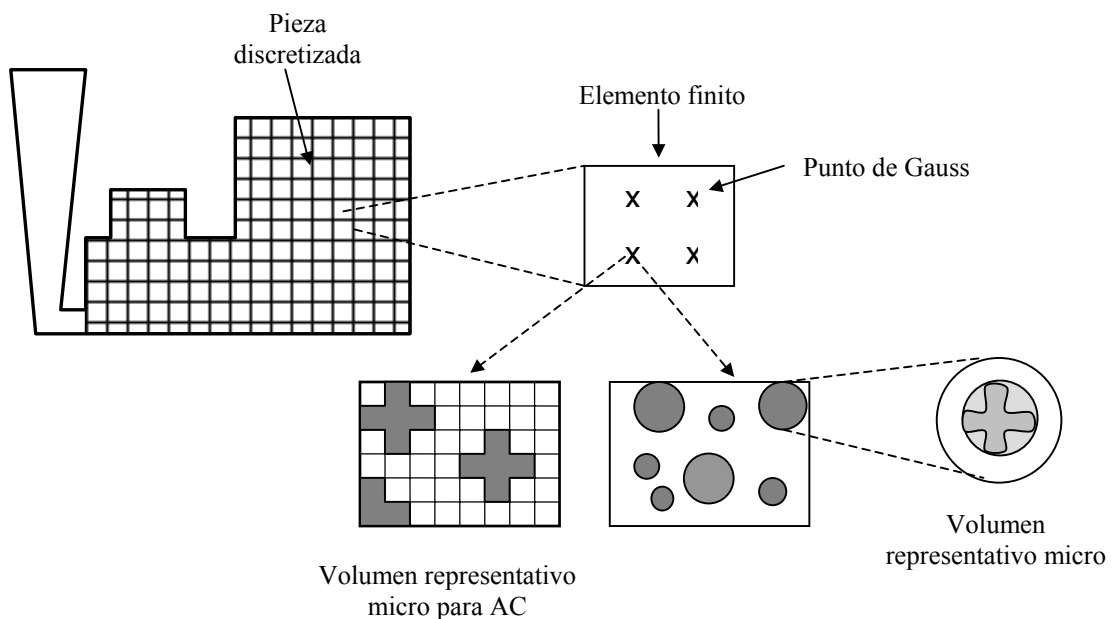


Figura III-3: Discretización de la pieza y volúmenes representativos microscópicos.

Los diferentes modelos microscópicos que se han formulado para tratar el problema de solidificación de metales y aleaciones, normalmente, no dan la función de cambio de fase en forma explícita, sino su variación temporal como función de las variaciones temporales de las distintas variables de estado independientes. En problemas de solidificación equiaxial se puede escribir:

$$\dot{f}_s = A_N \dot{N} + A_R \dot{r} \quad (\text{III-3})$$

siendo  $N$  la densidad de nucleación, y  $r$  el radio promedio de grano (su derivada temporal es la velocidad de crecimiento).

Los distintos modelos propuestos para la transformación líquido-sólido equiaxial de los metales y aleaciones difieren principalmente en las leyes de nucleación y de crecimiento de los granos. En el caso particular de la fundición dúctil se debe tener en cuenta además que existen dos teorías mediante las cuales se describe el fenómeno de transformación eutéctica, la uninodular y la plurinodular.

A continuación, se presentan algunos modelos numéricos publicados por distintos investigadores que tratan el aspecto microestructural de la solidificación de la fundición de hierro SG. Si bien algunos de estos trabajos consideran, además del proceso de solidificación del eutéctico, otras transformaciones tales como la solidificación de la austenita primaria, la posibilidad de la formación de fundición blanca y la transformación eutectoide, aquí sólo se presentan las ecuaciones que conciernen a la solidificación eutéctica estable.

*Solidification Process of Nodular Cast Iron* [79]. En este trabajo Wetterfall *et al.* tienen como principal objetivo comprender mejor el proceso de solidificación de la fundición dúctil desarrollando una técnica experimental confiable para tal propósito. El procedimiento empleado, que consiste básicamente en realizar un enfriamiento brusco a distintos tiempos de solidificación, se aplica a probetas de distintas composiciones (hipoeutéctica, eutéctica e hipereutéctica). Las distintas probetas son analizadas cualitativa y cuantitativamente.

También se realiza, para cada composición, un enfriamiento normal hasta el final de la solidificación, con el correspondiente registro de la temperatura en función del tiempo. Las curvas de enfriamiento obtenidas muestran que la meseta correspondiente a la transformación eutéctica no presentan recalescencia apreciable.

Los autores observan la presencia de dendritas de austenita aún en las composiciones eutécticas e hipereutécticas. También destacan la presencia de nódulos rodeados de líquido incluso en estados de solidificación muy avanzados. En algunas muestras se observan nódulos sólo parcialmente en contacto con la austenita. Evidentemente estas observaciones apoyan la teoría plurinodular de solidificación. Los autores también destacan que las muestras analizadas indicarían que la nucleación se produce durante todo el proceso de cambio de fase.

Para el crecimiento de los nódulos de grafito en contacto directo con el líquido los autores proponen aplicar la ecuación de Zener de crecimiento de una partícula esférica aislada en una matriz de baja supersaturación que para el caso en cuestión escriben como

$$r^2 = \frac{X^{l/\gamma} - X^{l/gr}}{X^{gr} - X^{l/gr}} \frac{V_m^{gr}}{V_m^l} D_c^l t \quad (\text{III-4})$$

Donde  $r$  es el radio del nódulo de grafito,  $X^{l/\gamma}$  es la fracción molar de carbono del líquido en equilibrio con la austenita,  $X^{gr}$  la fracción molar de carbono en el grafito,  $X^{l/gr}$  la fracción molar de carbono del líquido en equilibrio con el grafito,  $V_m^{gr}$  es el volumen molar del grafito y  $V_m^l$  el del líquido,  $D_c^l$  es el coeficiente de difusión del carbono en el líquido y  $t$  el tiempo.

Para el crecimiento del grafito rodeado por austenita se propone la siguiente ecuación

$$\frac{dr}{dt} = \frac{X^{l/\gamma} - X^{l/gr}}{X^{gr} - X^{l/gr}} \frac{V_m^{gr}}{V_m^l} \frac{1}{r^2 \left( \frac{1}{r} - \frac{1}{s} \right)} D_c^l \quad (\text{III-5})$$

estableciendo  $s/r = 2.4$ , donde  $s$  es el espesor de la capa de austenita.

*Computer Simulation of Solidification of Nodular Cast Iron* [74]. En este trabajo se presenta un modelo numérico para la simulación de la solidificación de la fundición dúctil y los resultados son comparados con los obtenidos experimentalmente. Las principales características del modelo son las siguientes:

- El modelo numérico propuesto se basa en la teoría uninodular.
- Se considera una aleación de composición eutéctica.
- Se simula una nucleación continua.
- No se tiene en cuenta la microsegregación del silicio.
- En la pieza la temperatura se considera variable.
- El calor latente generado se trata por el método llamado en inglés “temperature recovery”.
- La ecuación de conducción del calor a nivel macroscópico se resuelve por el método de diferencias finitas.
- La interacción entre los granos se tiene en cuenta en la fórmula de crecimiento de la capa esférica de austenita

#### *Nucleación:*

La nucleación se propone continua y dependiente del sobreenfriamiento, se supone además que la misma cesa cuando comienza la recalcancia, aunque los autores, teniendo en cuenta las diferencias que se observan entre las curvas de enfriamiento medidas y los resultados numéricos que obtienen, y haciendo referencia al trabajo de Wetterfall *et al.*,

consideran la posibilidad de que ésta se produzca, paulatinamente, durante toda la solidificación.

Para la determinación del número de nódulos que nuclea se realizan cálculos con dos leyes diferentes:

$$\frac{dN}{dt} = n A \Delta T^{n-1} \frac{d(\Delta T)}{dt} \quad \text{con } n = 2 \quad (\text{III-6})$$

$$\frac{dN}{dt} = A \Delta T^n \quad \text{con } n = 1 \text{ o } 2 \quad (\text{III-7})$$

Donde  $N$  es el número de nódulos por unidad de volumen,  $A$  y  $n$  son parámetros que dependen de las condiciones de inoculación y temperatura de colada y  $\Delta T$  es el sobreenfriamiento con respecto a la temperatura eutéctica.

Dado que se simula la teoría uninodular sólo se considera la nucleación del grafito.

Los autores concluyen que para la consideración de una nucleación que continúe incluso después de la recalcificación sería conveniente utilizar otras leyes de nucleación.

*Crecimiento:*

El crecimiento de los nódulos de grafito y de la capa esférica de austenita son controlados por la difusión del carbono.

Se considera que el nódulo de grafito es recubierto por la austenita inmediatamente después de la nucleación por lo que no se modela el crecimiento del mismo en contacto con el líquido. Se toma como radio inicial de los nódulos  $r_0 = 1 \mu\text{m}$  y  $s_0 = 1,2 \mu\text{m}$  para las esferas de austenita que lo rodean.

La ecuación utilizada para el crecimiento de la austenita es la siguiente

$$\frac{ds}{dt} = \frac{K_a}{s \left( \frac{s}{r} - 1 \right)} \quad \text{donde} \quad K_a = D_c^\gamma (C^{\gamma/l} - C^{\gamma/gr}) / (C^{l/\gamma} - C^{\gamma/l}) \quad (\text{III-8})$$

Para el de crecimiento del nódulo de grafito se propone

$$\frac{dr}{dt} = \frac{K_g}{r(1-r/s)} \quad \text{donde} \quad K_g = D_c^\gamma \frac{\rho_\gamma}{\rho_{gr}} (C^{\gamma/l} - C^{\gamma/gr}) / (100 - C^{\gamma/gr}) \quad (\text{III-9})$$

Siendo  $\rho_\gamma$  y  $\rho_c$  las densidades de la austenita y el grafito respectivamente,  $C^{\gamma/l}$  el porcentaje en masa de carbono en la austenita en contacto con el líquido,  $C^{l/\gamma}$  el porcentaje en masa de carbono en el líquido en contacto con la austenita y  $C^{\gamma/gr}$  el porcentaje en masa de carbono en la austenita en contacto con el grafito.

Cuando la fracción sólida alcanza el 0,5, se comienza a considerar la interacción entre las esferas que solidifican afectando a la ecuación ( III-8) de un factor de reducción, con lo que se obtiene

$$\frac{ds}{dt} = \frac{K_a}{s \left( \frac{s}{r} - 1 \right)} \left( \frac{1 - f_s}{1 - 0.5} \right)^{2/3} \quad (\text{III-10})$$

siendo  $f_s$  la fracción sólida.

Los cálculos se realizan con la relación de radios  $s/r$  constante (2.4) y también con  $s/r$  variable. Los autores concluyen que, dada la similitud de los resultados para los dos casos, desde el punto de vista del costo computacional resulta conveniente utilizar una relación constante ya que de lo contrario se debe reducir considerablemente el paso de tiempo utilizado. De la comparación con los resultados experimentales se observa que la ecuación ( III-6) no es apropiada para la nucleación de la fundición esferoidal y que probablemente la misma no se vea interrumpida definitivamente con la recalcificación sino que se produzca durante toda la solidificación.

Se destaca que con la disminución del paso de tiempo los resultados convergen a valores únicos.

La simulación de un proceso de solidificación teniendo en cuenta los aspectos principales del modelo microestructural propuesto por Su *et al.* en el trabajo citado es implementada y analizada en el Capítulo IV de esta tesis.

*A Computer-Aided Simulation of the Kinetics of Solidification of the Eutectic Ductile Cast Iron* [30]. En este trabajo se propone un modelo microestructural que responde a la teoría uninodular. Con él se calculan resultados para un elemento de fundición de temperatura uniforme y se analizan los mismos cualitativamente. No se comparan con resultados experimentales. La temperatura  $T$  en función del tiempo se obtiene mediante la resolución numérica de la siguiente ecuación diferencial

$$\frac{d(\Delta T)}{dt} = \frac{b_2 F (T_E - \Delta T - T_n) A E \sqrt{\pi t (\Delta T)^3 (t + t_1)}}{\sqrt{\pi (t + t_1)} (\phi - A E \sqrt{\Delta T t^3})} \quad (\text{III-11})$$

siendo:

$$A = 2\pi \cdot N \cdot V_0 \cdot a^3$$

$$E = \exp \left[ -\frac{4}{3} \pi \cdot N \cdot a^3 \cdot \sqrt{(\Delta T)^3 \cdot t^3} \right]$$

$$\phi = c V_0 \rho_l$$

donde el parámetro  $a$  depende de las características del diagrama de equilibrio binario, tales como composición y temperatura eutéctica y las pendientes de las líneas de sólidos,

líquidos y de solubilidad del carbono en la austenita, así como también del coeficiente de difusión del carbono en la austenita. El valor utilizado en el cálculo es  $a = 0,0561$ . El parámetro  $b_2$  es el coeficiente de acumulación de calor en el molde,  $F$  la superficie de la probeta fundida y  $V_0$  su volumen.

Las principales características del modelo de solidificación son:

- El modelo numérico propuesto se basa en la teoría uninodular
- Se considera composición eutéctica.
- Nucleación instantánea.
- No considera microsegregación del silicio.
- Se analiza un elemento de material en el que se supone temperatura uniforme.
- La interacción entre los granos es tenida en cuenta a través de la fórmula de Johnson-Mehl.

*Nucleación:*

El autor utiliza una nucleación instantánea. Todos los nódulos nuclean al mismo tiempo cuando la temperatura de la fundición (que se considera uniforme) desciende por debajo de la temperatura eutéctica.

*Crecimiento:*

Para tener en cuenta la interacción, la expresión del volumen solidificado es la siguiente:

$$V = V_0 \left[ 1 - \exp\left(-\frac{3}{4} \pi \cdot N \cdot s^3\right) \right] \quad (\text{III-12})$$

siendo  $V_0$  el volumen colado. Los demás símbolos corresponden a las mismas variables utilizadas anteriormente.

La fórmula que define la variación del volumen solidificado con el tiempo es

$$\frac{dV}{dt} = AE \left[ \sqrt{(\Delta T)^3 \cdot t} + \sqrt{(\Delta T) \cdot t^3} \cdot \frac{d\Delta T}{dt} \right] \quad (\text{III-13})$$

La relación entre los radios de la capa esférica de austenita y el nódulo de grafito se plantea como

$$\frac{s}{r} = \sqrt[3]{\frac{C^{gr} - C^{\gamma/gr}}{C^{l/\gamma} - C^{\gamma/l}}} \quad (\text{III-14})$$

y el valor del radio de los nódulos de grafito se expresa según

$$r = a \sqrt{t \Delta T} \quad (\text{III-15})$$

*Computer Simulation of the Structure Formed During Solidification of Cast Iron* [31]. En este trabajo se modela la solidificación de la fundición gris y de la fundición nodular, en ambos casos se considera la posibilidad de la formación de fundición blanca. El modelo numérico propuesto para la fundición nodular se basa en la teoría uninodular y sus características principales son las siguientes:

- El modelo numérico propuesto se basa en la teoría uninodular
- Se considera composición eutéctica.
- La nucleación se supone instantánea.
- No considera microsegregación del silicio.
- El transporte de calor en el molde de arena se resuelve mediante la fórmula de Chworinoff.
- En el elemento colado se considera temperatura uniforme.
- La relación entre el modelo macroscópico de transporte de calor y el microscópico se establece mediante el método de la entalpía.
- Se tiene en cuenta la interacción de los granos mediante la ecuación de Johnson-Mehl.

#### *Nucleación:*

Se considera nucleación instantánea, es decir que se supone que la totalidad de los nódulos nuclea simultáneamente.

#### *Crecimiento:*

Para el cálculo de la fracción sólida se tiene en cuenta la interacción de los granos según

$$f_s = \left[ 1 - \exp\left(-\frac{3}{4}\pi \cdot N \cdot s^3\right) \right] \quad (\text{III-16})$$

El crecimiento del radio de la austenita  $s$ , se calcula mediante la fórmula propuesta por Wetterfall *et al.* ( III-5) y tomando una relación  $s/r = 2.4$

*Computer Modeling of the Solidification of Eutectic Alloys: the Case of Cast Iron* [73]. En este trabajo se modela la solidificación de la fundición gris y de la fundición nodular y en ambos casos se considera la posibilidad de la formación de fundición blanca. Se simula también la transformación eutectoide. El modelo numérico propuesto para la solidificación de la fundición nodular se basa en la teoría uninodular y sus características principales son:

- El modelo numérico propuesto se basa en la teoría uninodular.
- Se considera composición hipoeutéctica por lo que se tiene en cuenta la solidificación de la austenita primaria.
- La nucleación se simula instantánea.
- No considera microsegregación del silicio.

- El transporte de calor en el molde de arena se resuelve mediante la fórmula de Chworinoff.
- En la pieza se considera temperatura uniforme.
- El acoplamiento entre los niveles macro y microscópico se realiza por el método de la entalpía.
- La ecuación diferencial se resuelve analíticamente.
- Se tiene en cuenta la interacción de los granos mediante la ecuación de Johnson-Mehl.

#### *Nucleación:*

Se considera nucleación instantánea que comienza a un determinado sobreenfriamiento, por lo que todos los núcleos comienzan a crecer al mismo tiempo y a la misma velocidad.

#### *Crecimiento:*

Se considera que los núcleos de grafito son envueltos por una esfera de austenita inmediatamente después de su formación.

El crecimiento del radio de la austenita  $s$ , se calcula mediante la fórmula propuesta por Wetterfall *et al.* ( III-5). Tomando una relación  $s/r = 2.4$ .

Los autores concluyen que para evitar la aparición de fundición blanca en la solidificación de una fundición dúctil es necesario realizar una buena inoculación que posibilite la aparición de un número suficientemente elevado de nódulos, lo que permite que la solidificación termine por encima de la temperatura de inicio de transformación de la fundición blanca. Los resultados numéricos obtenidos muestran que para evitar la formación de fundición blanca se requiere un densidad de nódulos mucho mayor que la que se presenta en los casos reales. Ante esta circunstancia los autores deducen que resulta muy probable que, aunque más no sea al principio de la solidificación, se produzca el crecimiento independiente de las dos fases del eutéctico.

*On the Solidification Kinetics of Spheroidal Graphite Cast Iron* [72]. En este trabajo los autores expresan que en la transformación eutéctica la austenita dendrítica y las esferas de grafito nuclean independientemente en el líquido. Consideran que el grafito puede ser encapsulado por la austenita antes o inmediatamente después de la colisión de los nódulos con las dendritas y que el crecimiento más significativo de las esferas de grafito se produce por difusión del carbono a través de la capa de austenita sólo después que las esferas se han adherido a las dendritas. Las dendritas de austenita crecen sólo parcialmente por la difusión del carbono y principalmente por el sobreenfriamiento y la sobresaturación del líquido.

En este trabajo se comparan resultados experimentales de una solidificación unidireccional con los resultados numéricos obtenidos con un modelo numérico uninodular cuyas características principales son las siguientes:

- El modelo numérico se basa en la teoría uninodular.
- Se considera composición eutéctica .



- Se considera Solidificación direccional.
- La nucleación se simula continua.
- No se tiene en cuenta la microsegregación del silicio.
- El acoplamiento entre los niveles macro y microscópico se realiza por el método del calor latente.
- La ecuación de la energía se plantea en forma unidimensional y se resuelve por diferencias finitas.
- Se tiene en cuenta la interacción de los granos calculando la fracción sólida mediante la ecuación de Johnson-Mehl.

#### *Nucleación:*

De la observación de los resultados experimentales los autores proponen una nucleación continua durante todo el intervalo de solidificación y que responde a la siguiente ley exponencial

$$N = K_1 + K_2 \exp\left(\frac{-K_3}{\Delta T^2}\right) \quad (\text{III-17})$$

donde  $K_1 = 0.8$ ,  $K_2 = 1.2$  y  $K_3 = 385$ .  $K_1$  aparece porque algunos nódulos de grafito nuclean como grafito primario

#### *Crecimiento:*

Para el crecimiento de la austenita se utiliza la ecuación ( III-8) y para el crecimiento del grafito la ecuación ( III-9) presentadas anteriormente.

Para el cálculo de la fracción sólida usa la ecuación de Jonson-Mehl

$$\frac{df_s}{dt} = (1 - f_s) 4\pi N s^2 \frac{ds}{dt} \quad (\text{III-18})$$

$$f_s = \left[ 1 - \exp\left(-\frac{3}{4}\pi \cdot N \cdot s^3\right) \right]$$

En la comparación entre los resultados numéricos y los experimentales los autores observan que:

- La fracción sólida experimental tiene una velocidad de crecimiento mayor que la calculada con el modelo controlado por difusión, esto sugiere que el crecimiento de la austenita no ocurre sólo por difusión como un envoltorio del grafito sino que las dendritas crecen principalmente debido al sobreenfriamiento y la sobresaturación del líquido.
- El modelo matemático predice una velocidad de crecimiento del grafito y de la austenita muy similares, sin embargo los resultados experimentales indican que el grafito crece más rápidamente al principio y la austenita más rápidamente al final.

*Microstructures and Solidification Kinetics of Cast Irons: Experimental Study and Theoretical Modelling of Equiaxed Solidification of S. G. And Grey Cast Iron* [12]. En este trabajo se comparan resultados experimentales con resultados numéricos obtenidos siguiendo un modelo de solidificación uninodular.

Se investiga el efecto de la velocidad de enfriamiento, la temperatura de colada, y la inoculación sobre aspectos tales como recalescencia, densidad de nódulos y distribución del tamaño de nódulos.

Las principales características del modelo numérico son:

- El modelo numérico se basa en la teoría uninodular.
- Se considera composición eutéctica.
- Se supone nucleación continua.
- No se tiene en cuenta la microsegregación del silicio.
- Se considera solidificación equiaxial.
- Se considera temperatura uniforme en el metal.
- La transferencia de calor está controlada por conducción en el molde.
- La fracción sólida se calcula con la ecuación de Johnson- Mehl.

*Nucleación:*

Basándose en la fórmula de Oldfield, se propone

$$dN = A_n (\Delta T)^{n-1} \cdot (1 - f_s) d\Delta T \quad (\text{III-19})$$

con  $A_n$  constante dependiente de las condiciones de colada y la inoculación y  $n = 1$  o  $2$ .

*Crecimiento:*

Para representar el crecimiento de la esfera de austenita se utiliza la ecuación ( III-8), considerando  $K_a = 3,08 \cdot 10^{-13} \Delta T \text{ m}^2 \text{ s}^{-1}$ . La relación entre el radio de la austenita y el del nódulo de grafito durante la reacción eutéctica se considera constante e igual a 2,4. La interacción entre los granos se tiene en cuenta mediante la ecuación de Johnson-Mehl.

Las curvas de enfriamiento obtenidas numéricamente presentan recalescencias 2 y 3 veces mayores a las que se observan en las curvas experimentales.

Los resultados experimentales muestran que, para una determinada composición, variando el diámetro de la probeta, es decir la velocidad de enfriamiento, el número de esferas de grafito es proporcional al máximo sobreenfriamiento. Cuando para un mismo diámetro de probeta, es decir las mismas condiciones de extracción de calor, se varía la composición ( $A_n$ ) el sobreenfriamiento aumenta cuando disminuye la densidad de nódulos. Los autores concluyen que en la ley de nucleación es conveniente hacer  $n = 1$  y que si bien el número total de nódulos se predice bastante bien con el modelo adoptado, no ocurre lo mismo con la distribución del tamaño de las esferas.

*The Solidification of Ductile Cast Iron* [6]. Las principales características del modelo propuesto en este trabajo para la solidificación de la fundición dúctil son:

- La simulación numérica responde a la teoría plurinodular.
- Se considera composición eutéctica.
- Se simula solidificación equiaxial.
- Se tiene en cuenta la variación de las propiedades del material con la temperatura.
- La ley de nucleación del grafito es continua.
- Se considera microsegregación del silicio, cuyo porcentaje influye en las temperaturas de equilibrio.
- Los niveles macro y microscópico se acoplan mediante el método del calor latente.
- La ecuación del calor se resuelve mediante el método de las diferencias finitas.

*Nucleación:*

La nucleación es continua, se detiene cuando comienza la recalcancia y responde a la siguiente ley exponencial

$$\frac{\partial N}{\partial t} = b\Delta T \exp\left(-\frac{c}{\Delta T}\right)(1-f_s) \quad (\text{III-20})$$

*Crecimiento de los nódulos en contacto con el líquido:*

Los nódulos crecen en contacto directo con el líquido hasta un tamaño de 6  $\mu\text{m}$ , y la ley de crecimiento se basa en la ecuación de Zener que para este caso resulta

$$r^2 = \frac{C^{l/\gamma} - C^{l/gr}}{C^{gr} - C^{l/gr}} \frac{\rho_l}{\rho_{gr}} D_C^l \cdot t \quad (\text{III-21})$$

*Crecimiento de los nódulos para radios mayores a 6  $\mu\text{m}$ :*

Se supone que cuando el radio de los nódulos de grafito supera los 6  $\mu\text{m}$  comienza a haber contacto con la austenita y se reduce la velocidad de crecimiento que ahora responde a la expresión

$$\frac{dr}{dt} = 1.911 \cdot \frac{(C_{\gamma/l} - C_{\gamma/gr})}{(C_{gr} - C_{\gamma/gr})} \frac{\rho_\gamma}{\rho_{gr}} \cdot D_c^\gamma \cdot \frac{(1-f_s)^{2/3}}{r} \quad (\text{III-22})$$

*Crecimiento de la austenita:*

El volumen de austenita se calcula mediante la regla de la palanca a partir del volumen de grafito.

Una mejor explicación de este modelo se presenta en el Capítulo V de esta tesis, en el que además se muestran los resultados obtenidos con el mismo.

*Prediction of Microstructural Evolution in SG Cast Iron from Solidification to Room Temperature* [23]. En este trabajo se simulan numéricamente los cambios de fase eutéctico y eutectoide, con la predicción del tamaño final de grano, las fracciones de ferrita y de perlita, el espaciamiento laminar de la perlita y las propiedades mecánicas resultantes.

El modelo de solidificación presenta las siguientes características:

- Se considera composición hipoeutéctica por lo que se tiene en cuenta la solidificación de la austenita primaria.
- La solidificación del eutéctico sigue la teoría uninodular y compite con el crecimiento de las dendritas de austenita primaria.
- Se simula una nucleación instantánea.
- No considera microsegregación del silicio.
- La ecuación macroscópica de la energía se resuelve mediante el método de los elementos finitos.
- El acoplamiento entre la ecuación de conducción del calor y el modelo micromecánico se realiza por el método del calor latente.
- Se tiene en cuenta la interacción de los granos mediante la ecuación de Johnson-Mehl.

#### *Nucleación:*

Se considera una ley de nucleación instantánea tanto para la austenita primaria como para el eutéctico.

#### *Crecimiento:*

La solidificación comienza con la nucleación y crecimiento de los granos dendríticos equiaxiales de austenita primaria. Esta solidificación se simula mediante esferas ideales que envuelven las puntas de las dendritas principales y que siguen su crecimiento. Para tener en cuenta que la esfera no es completamente sólida se usa el concepto de fracción de volumen interna. El crecimiento de las puntas de las dendritas principales viene dado por la siguiente expresión

$$\frac{dR_d}{dt} = \frac{D_c^l}{\pi^2 \Gamma (k-1) C_0} (C_i - C_a) \quad (\text{III-23})$$

donde  $\Gamma$  es el coeficiente de Gibbs-Thompson,  $k$  es el coeficiente de partición de equilibrio,  $C_0$  es la concentración de carbono inicial,  $C_i$  es la concentración de carbono del líquido en contacto con la austenita y  $C_a$  es la concentración promedio del líquido interdendrítico.

Cuando se alcanza la temperatura eutéctica nuclean y comienzan a crecer los granos eutécticos, estableciéndose una competencia entre ellos y los granos dendríticos de austenita primaria.

Se considera que el crecimiento de los granos eutécticos (nódulos de grafito rodeados por una capa también esférica de austenita), está controlado por la difusión de carbono a través de la capa de austenita. El crecimiento del radio de la esfera de austenita  $s$  se rige por la siguiente expresión

$$\frac{ds}{dt} = D_c^\gamma \frac{r}{s(s-r)} \frac{C^{\gamma/l} - C^{\gamma/gr}}{C^{l/\gamma} - C^{\gamma/l}} \quad (\text{III-24})$$

El radio del nódulo de grafito se obtiene a partir del siguiente balance de masa

$$\rho_{gr} \frac{4}{3} \pi \left[ (r^{t+\Delta t})^3 - (r^t)^3 \right] C_{gr} = \rho_\gamma \frac{4}{3} \pi \left[ (s^{t+\Delta t})^3 - (s^t)^3 \right] C^{\gamma/l} \quad (\text{III-25})$$

*Graphite Growth in S.G. Cast Irons: Simulation vs. Experiment* [83]. Este trabajo se concentra en el crecimiento del grafito para el que se considera no sólo la difusión del carbono sino también la cinética interfacial según la cual los átomos se añaden al sólido y se tienen en cuenta además los efectos de capilaridad. Se determina experimentalmente la influencia sobre la distribución de tamaño de los nódulos de parámetros de solidificación tales como la velocidad de enfriamiento y el grado de sobreenfriamiento alcanzado. Se comparan resultados numéricos y experimentales.

El modelo numérico de solidificación que se emplea tiene las siguientes características:

- El modelo de solidificación del eutéctico sigue la teoría uninodular.
- Se considera composición eutéctica.
- Se simula nucleación continua.
- No considera microsegregación del silicio.

*Nucleación:*

Considera nucleación heterogénea y continua del grafito, basada en la fórmula propuesta por Oldfield, para un determinado rango de temperatura (T, T-dT) se obtiene:

$$dN = A (\Delta T)^n \cdot (1 - f_s) \quad (\text{III-26})$$

En base a los resultados experimentales los autores determinan que los valores óptimos para los parámetros de nucleación son A=90 y n=2,5.

Se considera un radio inicial de los nódulos de 0,1  $\mu\text{m}$ .

*Crecimiento del grafito en contacto directo con el líquido:*

En el crecimiento del grafito en contacto con el líquido se tienen en cuenta los efectos de capilaridad y la cinética de la interfase a través de una modificación de la concentración de equilibrio en la intercara. (En los modelos de crecimiento basados exclusivamente en la difusión se toman las concentraciones de equilibrio).

La velocidad de crecimiento tiene que satisfacer en todo momento las ecuaciones de difusión y de cinética de interfase

$$\frac{dr}{dt} = \frac{X^{l/\gamma} - X_i}{X^{gr} - X_i} \frac{V_m^{gr}}{V_m^l} \frac{1}{r} D_c^l \quad (\text{III-27})$$

$$\frac{dr}{dt} = K_c (X_i - X^{l/gr})^m \quad (\text{III-28})$$

Donde  $K_c$  es el coeficiente de cinética de la interfase para crecimiento del grafito normal al plano basal,  $m$  se toma igual a 2.

El acuerdo entre las dos velocidades se realiza a través de un valor instantáneo de  $X_i$  que es la concentración promedio de carbono en el líquido en la interfase.

Otra disminución en la velocidad de crecimiento resulta cuando se tiene en cuenta la capilaridad, esta disminución depende de la curvatura del esferoide.

#### *Crecimiento del grafito encapsulado por la austenita:*

Una vez que el grafito es envuelto por la austenita la velocidad de crecimiento de los nódulos de grafito se rige por la expresión (III-5) propuesta por Weterfall *et al.*

De la comparación entre los resultados numéricos y los resultados experimentales los autores infieren que el crecimiento del grafito se encuentra dominado por la cinética de la interfase para radios de aproximadamente 1,5  $\mu\text{m}$  o menos, mientras que para radios mayores la difusión es la que juega un papel cada vez más importante.

El crecimiento del grafito envuelto por la austenita es aproximadamente cuatro veces menor al crecimiento del grafito en contacto directo con el líquido. Cuando la austenita envuelve al grafito la velocidad de crecimiento de la misma aumenta rápidamente hasta alcanzar un valor límite de  $s/r = 2,4$ .

Se determinó que el acuerdo entre los resultados numéricos y los experimentales pueden optimizarse permitiendo que el tamaño máximo de los esferoides de grafito creciendo sin envoltura de austenita sea 14  $\mu\text{m}$  cuando la temperatura es igual o mayor a 1148 °C y cero cuando la temperatura es igual o menor a 1138 °C y variando entre dichos límites según

$$\bar{r} = 14 - 700 \frac{1148 - T}{5} \quad (\text{III-29})$$

Al parecer la formación de la capa de austenita alrededor de los nódulos de grafito no sólo depende del tamaño de los mismos sino también del grado de sobreenfriamiento. Cuanto menor es la temperatura de crecimiento antes se forma la capa de austenita.

*Microstructure Simulation and Property Prediction of Spheroidal Graphite Iron Casting* [78]. En este trabajo se simulan las transformaciones eutéctica y eutectoide, se predicen además las propiedades mecánica a través de la relación de los porcentajes de perlita con la dureza del material y de la dureza con el resto de las propiedades mecánicas.

El modelo numérico de solidificación que se emplea tiene las siguientes características:

- El modelo de solidificación del eutéctico sigue la teoría uninodular.
- Se considera composición eutéctica.
- Se simula nucleación instantánea.
- No considera crecimiento del grafito en contacto con el líquido.
- No considera microsegregación del silicio.
- La ecuación macroscópica de la energía se resuelve mediante el método de las diferencias finitas.
- El acoplamiento entre la ecuación de conducción del calor y el modelo micromecánico se realiza por el método del calor latente.
- Se tiene en cuenta la interacción de los granos mediante la ecuación de Johnson-Mehl.

*Nucleación:*

La nucleación se propone instantánea y se supone que se produce a un determinado sobreenfriamiento llamado crítico según la siguiente expresión

$$N = K_1 + K_2 \left. \frac{dT}{dt} \right|_{T_i}^2 \quad (\text{III-30})$$

Donde  $K_1$  y  $K_2$  son constantes de determinación empírica.

*Crecimiento:*

El crecimiento de los nódulos de grafito y de la capa esférica de austenita son controlados por la difusión del carbono.

Para el crecimiento de la austenita y del grafito se utilizan las Ecuaciones ( III-8) y ( III-9) respectivamente.

De la comparación de los resultados numéricos y experimentales los autores concluyen que se obtiene una buena aproximación entre ambos.

*Study of Microstructure Simulation of Spheroidal Graphite Cast Iron* [45]. En este trabajo los autores consideran además de la transformación eutéctica, la solidificación de austenita primaria y de grafito primario y también la transformación eutectoide. Los resultados numéricos son comparados con resultados experimentales.

El modelo numérico de solidificación eutéctica presenta las siguientes características:

- El modelo numérico utilizado para tratar la solidificación eutéctica se basa en la teoría uninodular.
- Nucleación instantánea.
- No considera interacción entre los granos.
- No considera microsegregación del silicio.

*Nucleación:*

Se utiliza un modelo de nucleación instantánea según la expresión

$$N = K_a + K_b \left( \frac{dT}{dt} \right)^n \quad \left( \frac{dT}{dt} \neq 0 \right) \quad (\text{III-31})$$

Donde  $K_a$  y  $K_b$  son coeficientes de nucleación determinados experimentalmente y  $n = 1,5$ .

*Crecimiento del grafito en contacto directo con el líquido:*

Cuando los nódulos de grafito están en contacto con el líquido se supone que el crecimiento está controlado por la difusión del carbono y por la reacción en la intercara grafito-líquido

$$\frac{dr}{dt} = D_c^l \frac{\rho_l}{\rho_{gr}} \frac{\psi_0 (C_0 - C_{gr}^l)}{(\psi_0 r + D_c^l)(100 - C_{gr}^l)} \quad (\text{III-32})$$

Donde  $C_0$  es el contenido inicial de carbono y  $\psi_0$  es el volumen de grafito que precipita por unidad de área y unidad de tiempo a través de la intercara grafito-líquido.

*Crecimiento del grafito encapsulado por la austenita:*

La velocidad de crecimiento del radio de la esfera de austenita y la velocidad de crecimiento del nódulo de grafito son calculados mediante las fórmulas ( III-8) y ( III-9) presentadas anteriormente.

Los autores observan que la nucleación del grafito está determinada fundamentalmente por la velocidad de enfriamiento. Cuando mayor es la velocidad de enfriamiento mayor es el sobreenfriamiento y mayor el número de nódulos que nuclea. También concluyen que la transformación eutectoide depende, entre otras cosas, de las características de los nódulos de grafito.

*Numerical Modelling of the Solidification of Ductile Iron* [46]. El modelo microestructural de solidificación propuesto en este trabajo se caracteriza por:

- El modelo microestructural se basa en la teoría uninodular.
- No considera microsegregación del silicio.
- Nucleación instantánea.



- La ecuación del calor a nivel macroscópico se resuelve por el método de las diferencias finitas.
- El acoplamiento entre el nivel macroscópico y el micromodelo se realiza por el método del calor latente.
- Constantes físicas independientes de la temperatura.
- No considera crecimiento del grafito en contacto directo con el líquido.
- La fracción de sólido se calcula usando la expresión de Johnson-Mehl.

*Nucleación:*

Se simula una nucleación instantánea y dependiente de la velocidad de enfriamiento local y, según los resultados experimentales, puede expresarse como

$$N = 74.1 + 101.1 \log\left(\frac{dT}{dt}\right) \quad (\text{III-33})$$

*Crecimiento:*

Para el crecimiento del radio de la capa de austenita se utiliza la ecuación ( III-8) y para los nódulos de grafito se emplea la fórmula ( III-9).

*Modeling of Stable and Metastable Eutectic Transformation of Spheroidal Graphite Iron Casting* [82]. En este trabajo se propone un modelo numérico para la simulación del proceso estable y metaestable de solidificación de la fundición SG. Los resultados de la simulación matemática se comparan con los obtenidos experimentalmente. Las principales características del modelo son:

- El modelo propuesto se basa en la teoría uninodular.
- Nucleación continua.
- Se considera la microsegregación del Si y el Mn.
- Se analiza una composición hipereutéctica.
- La relación entre los niveles micro y macromecánico se realiza mediante el método “temperature recovery”.
- Se considera interacción entre los granos a través del modelo de Johnson-Mehl.

*Nucleación:*

Se considera una nucleación continua basada en la siguiente ecuación

$$\frac{dN}{dt} = A_n (\Delta T)^{n-1} \cdot (1 - f_s) \frac{d\Delta T}{dt} \quad (\text{III-34})$$

*Crecimiento de los nódulos de grafito en contacto directo con el líquido:*

El crecimiento de los nódulos de grafito en contacto directo con el líquido se rige por la siguiente ecuación

$$\frac{dr^t}{dt} = \frac{\rho_l(C_0 - C^{l/gr})}{\rho_{gr}(C_{gr} - C^{l/gr})} \frac{i^{t-dt}}{1 - \exp\left(\frac{-i^{t-dt}}{D_c^l} \delta\right)} \quad (\text{III-35})$$

donde  $\delta$  es el espesor de la capa de difusión del carbono en frente de la interfase líquido-grafito.

*Crecimiento después de que el nódulo fue encapsulado por la austenita:*

Se utilizan las mismas ecuaciones ( III-8) y ( III-9) usadas por K. Su *et al.* en el trabajo analizado anteriormente.

*Microsegregación:*

Las temperaturas eutécticas estables y metaestable son calculadas teniendo en cuenta la concentración del Si y del Mn en el líquido. A cada tiempo  $t$ , la distribución del elemento  $Y$  está dada aproximadamente por la ecuación

$$Y_s^t = K_Y Y_l^t \quad (\text{III-36})$$

En donde  $Y_s^t$  y  $Y_l^t$  son las concentraciones del elemento  $Y$  en el sólido y el líquido para el tiempo  $t$  respectivamente y  $K_Y$  su coeficiente de partición.

La concentración del elemento  $Y$  en el líquido para un cierto tiempo  $t$ , se obtiene de

$$Y_l^t = \frac{Y_0}{(1 - f_s^t)} - \frac{\left[ \sum_{t=0}^t (Y_s^t \rho_s df_s^t) \right]}{\rho_l(1 - f_s^t)} \quad (\text{III-37})$$

### III.4. CONCLUSIONES

En este capítulo se han señalado los tres niveles a los que puede analizarse el proceso de solidificación. Se realizó una breve descripción de la resolución del problema a nivel macromecánico y se presentaron los principales aspectos de los modelos micromecánicos desarrollados por distintos investigadores para la solidificación del eutéctico de la fundición de grafito esferoidal. Analizando dichos trabajos se ve claramente que para el tratamiento numérico de la solidificación equiaxial según la teoría uninodular han sido propuestos numerosos modelos, no ocurriendo lo mismo para la teoría plurinodular en la que el crecimiento dendrítico de la austenita complica notablemente la simulación. El modelo propuesto por Boeri [6] simula la solidificación plurinodular pero utilizando la regla de la palanca para el desarrollo de la fase austenita lo cual no permite obtener como resultado el tamaño de grano de austenita eutéctica que, si bien desaparece durante la

transformación eutectoide, tiene probada influencia sobre la misma. Wetterfall *et al.* en la Ref. [79] y Stefanescu *et al.* en la Ref. [72] describen claramente un proceso de solidificación eutéctica plurinodular, pero realizan la comparación de los resultados experimentales con los obtenidos mediante un modelo de carácter uninodular.

En algunos de los trabajos estudiados se consideran dos leyes para el crecimiento de los nódulos de grafito, una para cuando éstos están en contacto directo con el líquido y otra para cuando están envueltos en una capa de austenita. En la mayor parte de los artículos para ambos casos el crecimiento se supone regido por la difusión del carbono, mientras que en las Ref. [45] y [83] se tiene en cuenta también la cinética interfacial de los átomos que saltan del líquido al sólido y el fenómeno de capilaridad, sin embargo se considera que estos últimos aspectos influyen sólo en las primeras etapas del crecimiento, cuando los radios de los nódulos son inferiores  $1,5 \mu\text{m}$  [83].

Las nucleaciones se proponen instantáneas o continuas y en su mayoría dependen del sobreenfriamiento o de la velocidad de enfriamiento. En todas se consideran parámetros que resultan de las características de inoculación y de la composición química del material y que deben ser ajustados experimentalmente. En muchos de los trabajos se determina el final de la nucleación cuando se produce la recalescencia, sin embargo algunos autores opinan [72,74,79], basados en lo observado en las comparaciones realizadas con resultados empíricos, que resulta muy probable que nuevos nódulos de grafito aparezcan durante el resto del proceso de solidificación.

El acoplamiento entre la ecuación de la energía a nivel macroscópico y el modelo microestructural se realiza de diferentes modos, “temperature recovery”, método de la entalpía y método del calor latente. En algunos de los trabajos la resolución numérica se simplifica considerando temperatura uniforme en la pieza analizada y determinando la velocidad de extracción del calor en base a la conducción del calor en el molde. Cuando se tiene en cuenta la variación de temperatura en la pieza, en general se utiliza como herramienta de resolución el método de las diferencias finitas y en algunos casos se emplea el método de los elementos finitos.

De lo analizado y teniendo en cuenta además que en la actualidad son muchos los investigadores que adhieren a la teoría plurinodular de solidificación (tal como se vio en el Capítulo II) surge claramente la necesidad de desarrollar modelos que mejoren el tratamiento de la fase austenita del eutéctico y que permitan de esta manera aproximarse mejor a la descripción que la teoría plurinodular hace de la solidificación eutéctica de la fundición dúctil. El desarrollo de dicho modelo sería de gran importancia tanto para ser utilizado por la industria en el desarrollo de piezas fundidas como para la corroboración o modificación de la teoría explicativa del fenómeno. En el Capítulo VII de esta tesis se propone un novedoso modelo que presenta avances en la simulación numérica de la teoría plurinodular.



## CAPÍTULO IV

### MODELO UNINODULAR

#### IV.1. INTRODUCCIÓN

Como ya se mencionó en capítulos anteriores, en la actualidad subsisten principalmente dos teorías explicativas del proceso de solidificación de la fundición de grafito esferoidal: la teoría uninodular y la teoría plurinodular. En este capítulo se describe un modelo para la simulación de la solidificación equiaxial de una fundición dúctil de composición eutéctica según la teoría uninodular.

Tanto la ley de nucleación como las leyes de crecimiento de los nódulos de grafito y de la austenita utilizadas en el modelo tratado en este capítulo se basan en las presentadas por Su *et al.* [74], pero se tienen en cuenta además otras consideraciones, tales como la microsegregación del silicio y la variación del diagrama de equilibrio resultante de la modificación de la composición del líquido.

En la Sección IV.2. se presentan los aspectos fundamentales del modelo uninodular implementado y en la Sección IV.3. se muestra la sensibilidad de los resultados obtenidos mediante el cálculo, con respecto a algunos parámetros que definen el comportamiento de la microestructura. Finalmente se tratan las conclusiones en la Sección IV.4.

#### IV.2. MODELO MICROESTRUCTURAL DE LA FUNDICIÓN ESFEROIDAL

El primer modelo microestructural implementado en esta tesis simula la solidificación equiaxial estable de una fundición nodular de composición eutéctica según la teoría uninodular. Se considera la microsegregación del silicio, lo que ocasiona la constante modificación de la composición del líquido. Se tiene en cuenta la interacción de los granos, que afecta la velocidad de crecimiento de los mismos sobre todo en las etapas finales de la solidificación, mediante un factor de reducción aplicado a partir de una fracción sólida  $f_s = 0.5$  [74].

Se considera la variación de las composiciones de equilibrio causadas por la microsegregación del Si adoptando las definiciones de las curvas del diagrama de equilibrio realizadas por Heine *et al.* [38] y la implementación, en una simulación numérica para la solidificación de una fundición dúctil, llevada a cabo por Boeri [6].

Se adoptan una ley de nucleación continua hasta la recalcancia para el grafito y leyes de crecimiento basadas en la difusión del carbono para el grafito y la austenita.

### IV.2.1. Composición en las interfaces

Para la determinación de las composiciones de equilibrio de las distintas fases en las zonas de interfase 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, sólidos y temperatura de equilibrio eutéctica están definidas por funciones que dependen de los contenidos de silicio (Si) y de carbono (C) en la fundición que solidifica, de acuerdo a las expresiones obtenidas por Heine *et al.* [38] y utilizadas por otros autores [6,25,26,28].

$$\begin{aligned}
 T_{AL} &= 1569 - 97.3 \left( C + \frac{1}{4} Si \right) \\
 T_{AS} &= 1528 - 177.9(C + 0.18Si) \\
 T_{GL} &= 389.1 \left( C + \frac{1}{3} Si \right) - 503.2 \\
 T_E &= 1154.6 + 6.5Si
 \end{aligned}
 \tag{IV-1}$$

El significado de las temperaturas  $T_{AL}$ ,  $T_{AS}$ ,  $T_{GL}$  y  $T_E$ , puede verse en el esquema de la Figura IV-1 que corresponde a un sector del diagrama de equilibrio Fe-C-Si para un determinado porcentaje de Si

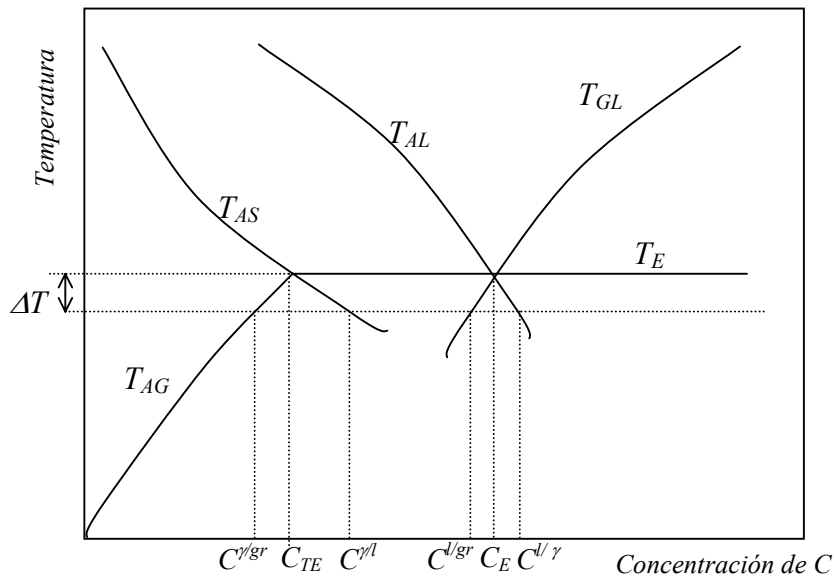


Figura IV-1: Esquema de la región eutéctica de un diagrama un Fe-C-Si para un determinado porcentaje de Si.

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

$$C_{TE} = 2.1 - 0.216Si \quad (IV-2)$$

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

$$C_E = 4.26 - 0.317Si \quad (IV-3)$$

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

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

$$C^{\gamma/l} = \frac{1}{177.9}(1528.4 - T - 32Si) \quad (IV-4)$$

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

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 [6]

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

Como se puede ver en el diagrama de la Figura IV-1, las curvas se hacen continuar por debajo de la temperatura eutéctica, de manera que si la temperatura desciende 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. Es importante destacar que en los cálculos se considera que en las interfases se cumplen las condiciones de equilibrio determinadas por el diagrama ternario, es decir que las curvas definidas determinan la composición que deben tener las fases en la zona de contacto entre ellas para una determinada temperatura. Esto no ocurre en el resto del volumen de la fundición en donde la composición depende de la difusión del soluto.

#### IV.2.2. Microsegregación

Contrariamente a lo que ocurre con los metales puros, cuando una aleación solidifica el sólido que se forma tiene una composición diferente a la del líquido del cual está

solidificando. Esto ocurre debido a que el proceso de cambio de fase de líquido a sólido no se da a una temperatura constante sino en un rango de temperaturas dentro del cual varían la composición del sólido y del líquido que se mantienen en equilibrio. Esto ocasiona que, al final del proceso, exista una distribución no uniforme del soluto en el sólido denominada segregación. En este trabajo se considera la microsegregación del silicio a través de un coeficiente de partición  $k_{si}$  que relaciona las concentraciones de silicio en el sólido y en el líquido, y de la ley de Scheil, que determina el porcentaje de soluto en el líquido suponiendo difusión nula en el sólido y composición uniforme (mezcla total) en el líquido

$$S_i = S_{i_0} (1 - f_s)^{k_{si}-1} \quad (\text{IV-6})$$

donde  $S_{i_0}$  es el porcentaje de silicio inicial y  $f_s$  es la fracción sólida.

### IV.2.3. Nucleación del grafito

Se utiliza una ley de nucleación continua empleada por Su *et al.* [74] :

$$\dot{N} = A \Delta T^n \quad (\text{IV-7})$$

donde  $\dot{N}$  es la derivada con respecto al tiempo de la densidad de núcleos de grafito,  $A$  es un parámetro de nucleación que tiene en cuenta el tratamiento del líquido especialmente el nivel de inoculación,  $\Delta T$  es el sobreenfriamiento con respecto a la temperatura eutéctica (Ver Figura IV-1) y  $n$  es un exponente que puede valer 1 o 2.

Se considera que la nucleación del grafito se detiene cuando se produce recalcancia, es decir cuando la temperatura en lugar de continuar descendiendo asciende. Esto se produce como consecuencia de que la velocidad de liberación del calor latente como producto de la solidificación es mayor que la velocidad de evacuación del mismo.

### IV.2.4. Crecimiento de la envoltura de austenita

La teoría uninodular sostiene que los nódulos de grafito que nuclean pueden crecer en contacto con el líquido muy corto tiempo ya que, rápidamente, son rodeados por austenita y el crecimiento continúa por difusión del carbono a través de ésta. Wetterfall *et al.* [79] concluyen que si bien la velocidad de crecimiento de los nódulos en contacto con el líquido es mayor que la que se produce cuando las esferas han sido cubiertas por austenita, es en esta segunda circunstancia en la que se da el mayor aumento de volumen, debido al tiempo que transcurre hasta finalizar la solidificación. En la simulación que se implementa en este capítulo se adopta la hipótesis de Su *et al.* [74] que supone que los nódulos de grafito son rodeados inmediatamente por una capa de austenita, de manera que su crecimiento se realiza desde el comienzo por difusión del carbono a través de dicha capa. Como en la Ref. [74] se adopta como radio inicial de las esferas de grafito  $R_{gr} = 1 \mu\text{m}$  y para la austenita  $R_\gamma = 1.2 \mu\text{m}$ , despreciándose el calor latente generado en la nucleación.



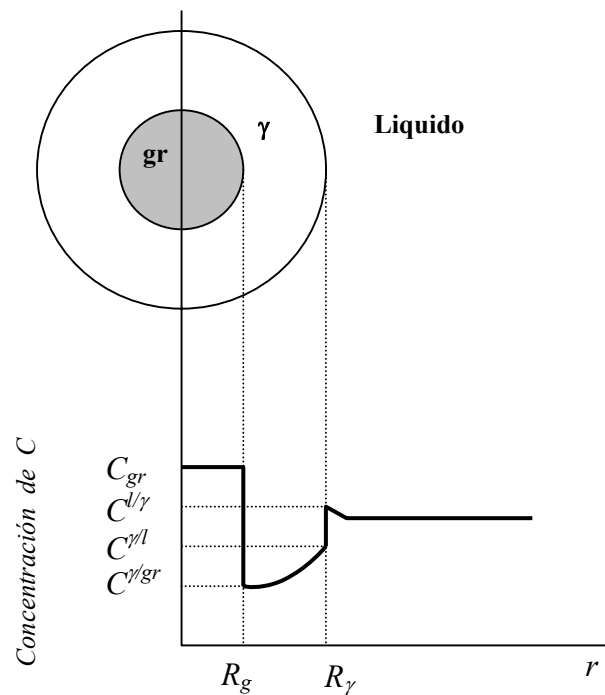


Figura IV-2: Perfil de concentración de carbono en el nódulo de grafito y en la cápsula de austenita.

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

$$D \frac{\partial}{\partial t} \left( r^2 \frac{\partial C}{\partial r} \right) = \frac{\partial C}{\partial t} \quad (\text{IV-8})$$

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 consideran constantes en cada paso de tiempo, se puede expresar

$$D \frac{\partial}{\partial t} \left( r^2 \frac{\partial C}{\partial r} \right) = 0 \quad (\text{IV-9})$$

cuya solución general es

$$C = -\frac{a}{r} + b \quad (\text{IV-10})$$

Derivando (IV-10) con respecto al radio se obtiene

$$\frac{dC}{dr} = \frac{a}{r^2} \quad (\text{IV-11})$$

Teniendo en cuenta las siguientes condiciones de contorno en ambos límites de la austenita

$$\begin{aligned} \text{para } r = R_\gamma & , \quad C = C^{\gamma/l} \\ \text{para } r = R_{gr} & , \quad C = C^{\gamma/gr} \end{aligned}$$

según (IV-10) se puede expresar

$$\begin{aligned} C^{\gamma/gr} &= -\frac{a}{R_{gr}} + b \\ C^{\gamma/l} &= -\frac{a}{R_\gamma} + b \end{aligned} \quad (\text{IV-12})$$

Restando las expresiones anteriores se obtiene

$$C^{\gamma/l} - C^{\gamma/gr} = a \left( -\frac{1}{R_\gamma} + \frac{1}{R_{gr}} \right)$$

y despejando la constante  $a$  se llega a la siguiente expresión

$$a = \frac{R_{gr} (C^{\gamma/l} - C^{\gamma/gr})}{\left( -\frac{R_{gr}}{R_\gamma} + 1 \right)} \quad (\text{IV-13})$$

Remplazando  $a$  en la expresión (IV-11) se obtiene el gradiente de concentración en  $r = R_\gamma$

$$\left. \frac{dC}{dr} \right|_{r=R_\gamma} = \frac{R_{gr} (C^{\gamma/l} - C^{\gamma/gr})}{R_\gamma (-R_{gr} + R_\gamma)} \quad (\text{IV-14})$$

Considerando iguales la densidad de la austenita y la densidad del líquido, la igualdad (IV-15) expresa el equilibrio de masa de soluto entre el líquido y la capa de austenita .

$$\frac{d}{dt} \left[ \frac{4}{3} \pi R_\gamma^3 \rho_\gamma (C^{l/\gamma} - C^{\gamma/l}) \right] = 4\pi R_\gamma^2 \rho_\gamma D \left. \frac{\partial C}{\partial r} \right|_{r=R_\gamma} \quad (\text{IV-15})$$

Derivando y reemplazando el gradiente por la expresión dada en (IV-14) se obtiene la velocidad de crecimiento de la austenita como

$$\frac{dR_\gamma}{dt} = D \frac{(C^{\gamma/l} - C^{\gamma/gr})}{R_\gamma \left( -1 + \frac{R_\gamma}{R_{gr}} \right) (C^{l/\gamma} - C^{\gamma/l})} \quad (\text{IV-16})$$

Dado que cada unidad de solidificación (nódulo de grafito-envoltura de austenita) posee una forma esférica durante el crecimiento, antes de que finalice la solidificación se comienzan a producir interferencias entre las esferas que, evidentemente, modifican la velocidad de crecimiento disminuyéndola. Para tener en cuenta este efecto, cuando el porcentaje de sólido alcanza el 50% el crecimiento de la esfera de austenita dado por (IV-16) se multiplica por un factor que tiene en cuenta la interferencia y se calcula con la siguiente fórmula

$$\frac{dR_\gamma}{dt} = D \frac{R_{gr} (C^{\gamma/l} - C^{\gamma/gr})}{R_\gamma (-R_{gr} + R_\gamma) (C^{l/\gamma} - C^{\gamma/l})} \left( \frac{1 - f_s}{1 - 0.5} \right)^{2/3} \quad (\text{IV-17})$$

#### IV.2.5. Crecimiento de los nódulos de grafito

Siguiendo el mismo razonamiento empleado en el punto anterior se llega a la expresión de la velocidad de crecimiento del radio del nódulo de grafito  $R_{gr}$ .

En este caso la condición de contorno a considerar es la correspondiente al límite grafito - austenita

$$\text{para } r = R_{gr}, \quad C = C^{\gamma/gr}$$

de manera que el gradiente queda expresado como

$$\left. \frac{dC}{dt} \right|_{r=R_{gr}} = \frac{R_\gamma (C^{\gamma/l} - C^{\gamma/gr})}{R_{gr} (-R_{gr} + R_\gamma)} \quad (\text{IV-18})$$

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

$$\frac{dR_{gr}}{dt} = D \frac{\rho_\gamma (C^{\gamma/l} - C^{\gamma/gr})}{\rho_{gr} (C_{gr} - C^{\gamma/gr})} \frac{1}{R_{gr} \left( 1 - \frac{R_{gr}}{R_\gamma} \right)} \quad (\text{IV-19})$$

### IV.3. ANÁLISIS DE SENSIBILIDAD DEL MODELO MICROESTRUCTURAL

Se analiza la respuesta del modelo microestructural de nucleación y crecimiento a la variación de la velocidad de enfriamiento y de la constante de nucleación  $A$ . El cálculo se realiza para un único elemento de fundición, en el que el flujo de calor se considera unidireccional (ver Figura IV-3). La velocidad de extracción del calor se mantiene constante en cada cálculo.

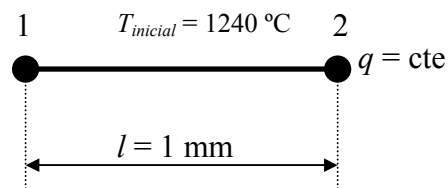


Figura IV-3: Elemento unidimensional.

El exponente de nucleación  $n$  se toma igual a 2.

El acoplamiento entre los niveles macro y micromecánico se realiza por medio de la función de cambio de fase, tal como fue comentado en el Capítulo III. 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.

Los cálculos se realizan con una relación constante  $R_\gamma / R_{gr} = 2,4$  [74,79]. Su [74] determina que los resultados de los cálculos realizados con la relación  $R_\gamma / R_{gr}$  variable aproximan dicha relación a 2.4 razón por la cual la utiliza para acelerar el cálculo. El valor 2.4 coincide con el calculado por Wetterfall [79] en base al volumen de grafito para una solidificación de equilibrio.

#### IV.3.1. Influencia del parámetro $A$

A medida que el valor de la constante  $A$  aumenta, en la Figura IV-4 se aprecia una disminución tanto del sobreenfriamiento como de la amplitud de la recalescencia. Este comportamiento de las curvas de enfriamiento resulta lógico, ya que al aumentar la velocidad de nucleación de los nódulos para igual sobreenfriamiento y comenzar éstos a crecer, el calor latente que se genera equilibra y supera más rápidamente el flujo de calor que se está extrayendo y que, en este caso, es constante.

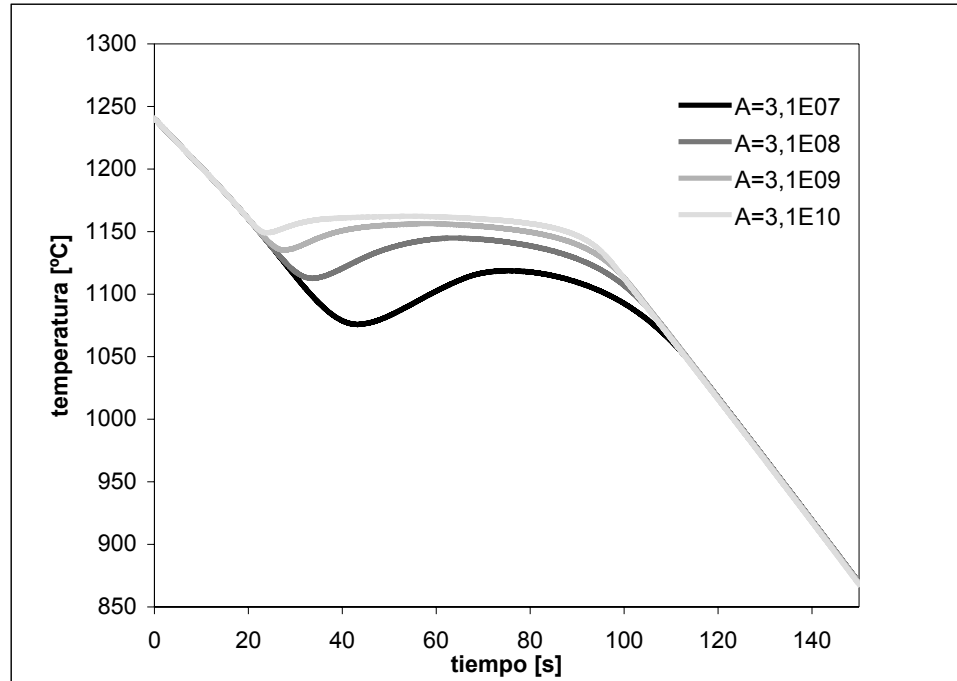


Figura IV-4: Curvas de enfriamiento para distintos valores de la constante de nucleación  $A$ .

En la Figura IV-5 se observa que el tiempo total de solidificación resulta menor en los cálculos realizados con valores mayores del parámetro  $A$ . Es importante destacar que dadas las características del planteo, en el cual lo único que cambia de un caso a otro es el valor de la constante  $A$ , el tiempo de comienzo de la nucleación es igual para todas las curvas.

Como puede apreciarse al observar las pendientes de las curvas de la Figura IV-5, la velocidad de enfriamiento varía a lo largo del proceso de solidificación, aumentando hacia llegar a la mitad de la solidificación y disminuyendo luego hacia el final de la misma. Los mayores cambios en la velocidad de solidificación (pendiente de la curva) se producen al comienzo y final de la solidificación y son más pronunciados para los valores mayores de  $A$ .

Como resulta lógico esperar, la cantidad final de nódulos de grafito en la Figura IV-6 (a) aumenta con el aumento del valor de la constante  $A$  (mayor inoculación), mientras que el máximo valor del radio que alcanzan los nódulos de grafito disminuye, tal como lo muestra la Figura IV-6 (b).

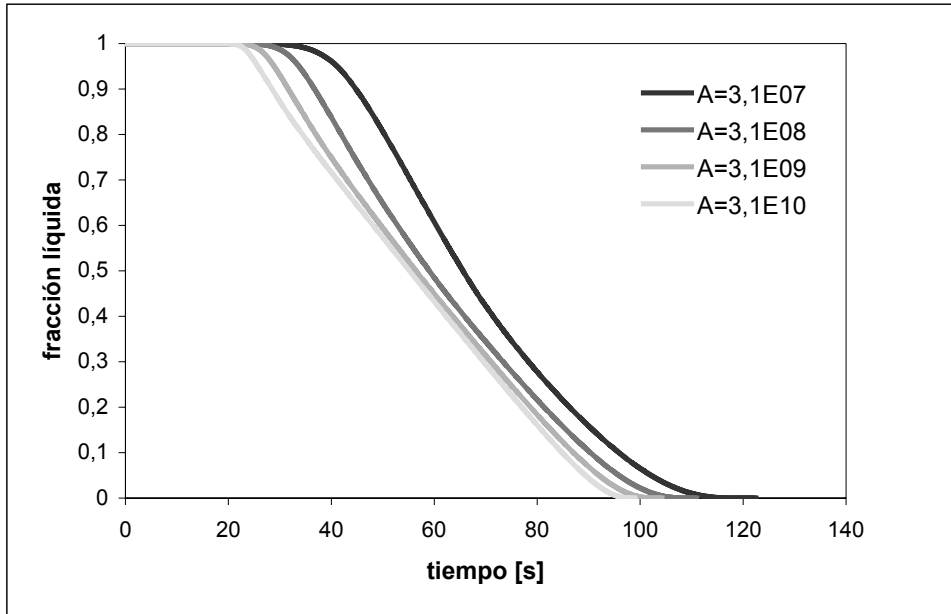


Figura IV-5: Evolución de la fracción líquida para distintos valores de la constante de nucleación  $A$ .

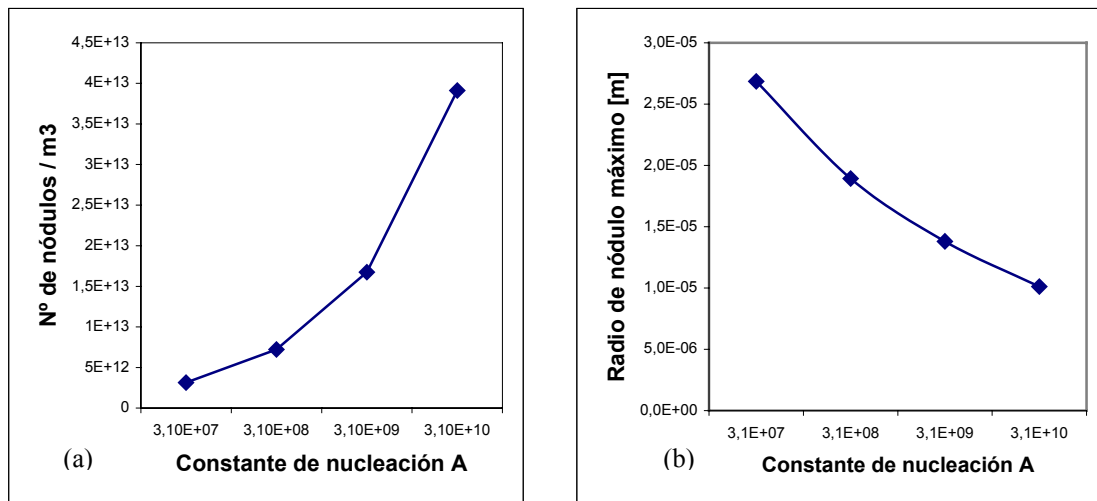


Figura IV-6: (a) Conteo nodular para distintos valores de la constante de nucleación  $A$ , (b) Máximo radio de nódulos para distintos valores de la constante de nucleación  $A$ .

### IV.3.2. Influencia de la velocidad de enfriamiento

La microestructura final de una fundición depende en gran medida de la velocidad de enfriamiento. Nótese que este efecto no se puede describir mediante un modelo macroscópico ya que, en ese caso, el “camino de solidificación” dado por la curva  $f_s-T$  es

único [14]. En un caso real, la velocidad con que se enfría la fundición depende de la combinación de varios factores, tales como las características y tamaño del molde, las condiciones del ambiente, y la temperatura de colada, entre otros. En el presente cálculo, por su simplicidad, se varía la velocidad de enfriamiento directamente modificando la velocidad de extracción de calor  $q$ .

En la Figura IV-7 se puede ver cómo al aumentar  $q$  aumenta la pendiente de las curvas de enfriamiento y disminuye la recaescencia y la longitud de la meseta.

Como resulta lógico, el tiempo de solidificación se incrementa a medida que disminuye  $q$ , tal como lo ilustra la Figura IV-8. Se debe tener en cuenta que variando  $q$  varía el tiempo de comienzo de solidificación ya que cambia el lapso para alcanzar la temperatura eutéctica, que es la misma en todos los casos. Cuanto más rápido se extrae el calor, antes se alcanza la temperatura de comienzo de solidificación.

La Figura IV-9 (a) muestra que al aumentar la velocidad de enfriamiento aumenta el número de nódulos por unidad de volumen final, lo que coincide con las observaciones experimentales realizadas en numerosos trabajos y la Figura IV-9 (b) ilustra cómo disminuye el tamaño máximo de las esferas que, evidentemente disponen de menos tiempo para crecer.

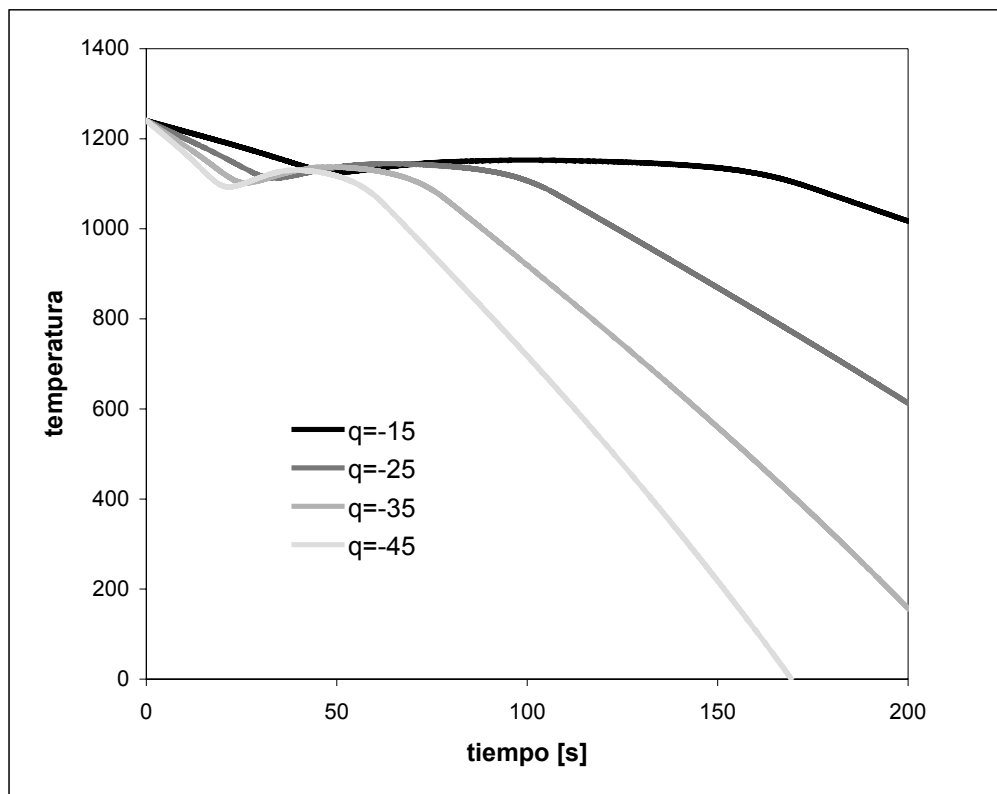


Figura IV-7: Curvas de enfriamiento para distintas velocidades de extracción del calor  $q$ .

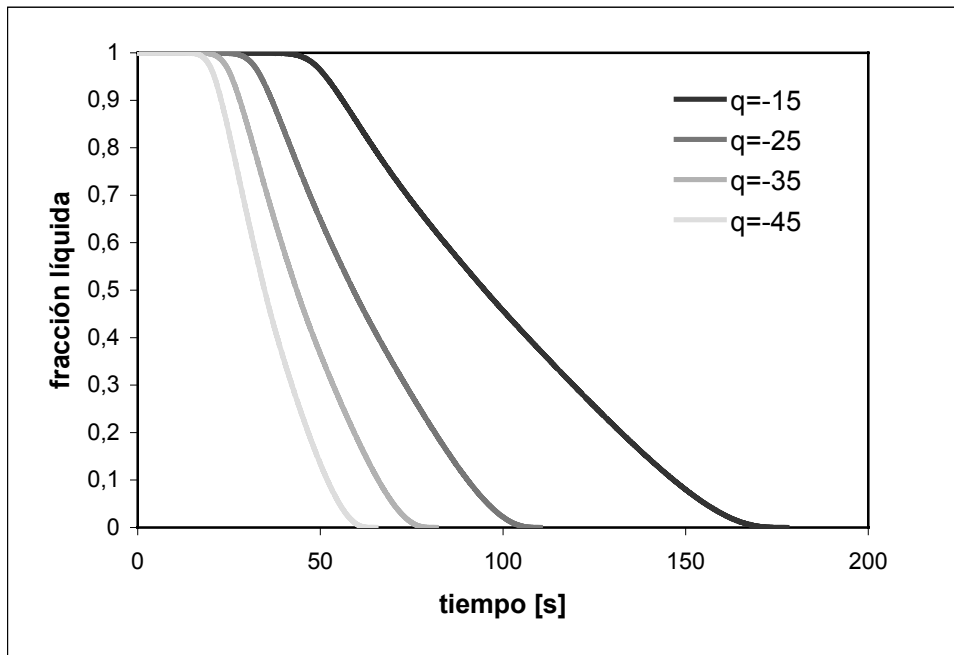


Figura IV-8: Evolución de la fracción líquida para distintas velocidades de extracción del calor  $q$ .

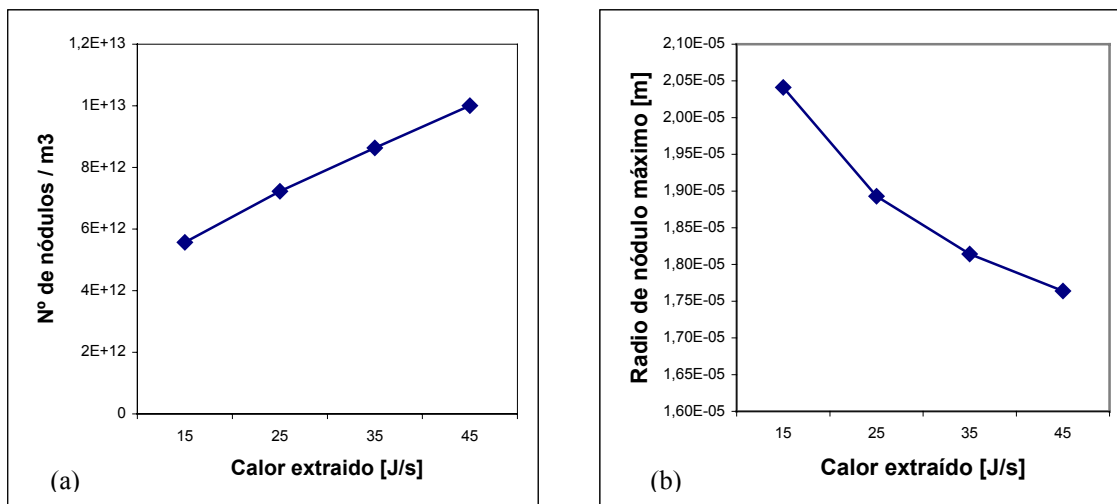


Figura IV-9: (a) Conteo nodular para distintas velocidades de extracción del calor  $q$ , (b) Máximo radio de nódulos para distintas velocidades de extracción del calor  $q$ .



#### IV.4. CONCLUSIONES

En este capítulo se ha presentado un modelo para la simulación numérica de la solidificación de la fundición dúctil siguiendo los postulados de la teoría uninodular y basado en las leyes de nucleación y crecimiento y en las principales hipótesis propuestas por Su *et al.* en [74]. Además se considera la microsegregación del Si y la variación que ésta ocasiona en las concentraciones de equilibrio.

El micromodelo se acopló con la resolución, a nivel macroscópico, de la ecuación del calor que se realiza mediante el método de los Elementos Finitos.

Del análisis del comportamiento del modelo frente al cambio de parámetros tales como la constante de nucleación  $A$  y la velocidad de enfriamiento  $q$  se comprobó que los resultados varían de la forma esperada y acorde a lo que ocurre en estudios experimentales. Una mayor inoculación (mayor  $A$ ), ocasiona mayor número de nódulos de menor tamaño y produce una pequeña disminución en el tiempo de solidificación. El aumento de la velocidad de enfriamiento, que en el análisis se provoca aumentando  $q$ , resulta también en una mayor densidad de nódulos más pequeños.

El modelo no tiene en cuenta qué ocurre con la capa de austenita para que sea físicamente posible el crecimiento del nódulo de grafito que ésta envuelve.



## *CAPÍTULO V*

### **MODELO PLURINODULAR**

#### **V.1. INTRODUCCIÓN**

Como ya fue mencionado anteriormente, si bien existen numerosas propuestas de modelos numéricos para la simulación microestructural del proceso de solidificación de la fundición dúctil, casi la totalidad de los mismos responden, con pequeñas variaciones entre ellos, a la teoría uninodular de solidificación. Esto ocurre aún cuando ya es bastante generalizada la aceptación de la teoría plurinodular. En este capítulo se presenta la implementación de un modelo plurinodular desarrollado por Boeri [6]. Dicho modelo microestructural, que originalmente se resolvió por el método de diferencias finitas, en este trabajo se adapta a un programa que resuelve la ecuación de la energía por el método de elementos finitos.

El modelo microestructural que simula la solidificación de la aleación es descrito en la Sección V.2. En la Sección V.3. se muestra la sensibilidad de los resultados obtenidos mediante el cálculo, con respecto a algunos parámetros que definen el comportamiento de la microestructura. Finalmente se tratan las conclusiones en la Sección V.4.

#### **V.2. MODELO MICROESTRUCTURAL DE LA FUNDICIÓN ESFEROIDAL**

El modelo microestructural implementado simula la solidificación equiaxial estable de una fundición nodular de composición eutéctica según la teoría plurinodular.

Se utiliza una ley de nucleación continua exponencial para el grafito. Se plantean dos leyes de crecimiento del grafito, una para cuando los nódulos están en contacto con el líquido y otra para cuando ya han sido rodeados por la austenita. La determinación de la fracción de austenita se realiza mediante la regla de la palanca. Se considera la microsegregación del silicio, lo que ocasiona la constante modificación de la composición del líquido. Se tiene en cuenta la interacción de los granos, que afecta la velocidad de crecimiento de los mismos, sobre todo en las etapas finales de la solidificación.

##### **V.2.1. Composición en las interfases**

La determinación de las temperaturas y composiciones de equilibrio se realiza tal como se describió en el Capítulo IV , siendo las fórmulas utilizadas las siguientes

$$\begin{aligned}
T_{AL} &= 1569 - 97.3 \left( C + \frac{1}{4} Si \right) \\
T_{AS} &= 1528 - 177.9(C + 0.18Si) \\
T_{GL} &= 389.1 \left( C + \frac{1}{3} Si \right) - 503.2 \\
T_E &= 1154.6 + 6.5Si
\end{aligned} \tag{V-1}$$

$$\begin{aligned}
C_{TE} &= 2.1 - 0.216Si \\
C_E &= 4.26 - 0.317Si \\
C^{\gamma/\gamma} &= \frac{1}{97.3} (1569 - T - 24.32Si) \\
C^{\gamma/\alpha} &= \frac{1}{177.9} (1528.4 - T - 32Si) \\
C^{\beta/gr} &= \frac{1}{389.1} (T - 129.7Si + 503.2) \\
C^{\gamma/gr} &= \frac{(T - 1154.6 - 6.5Si)(1.5 - 0.216Si)}{(354.6 + 6.5Si)} + 2.1 - 0.216Si
\end{aligned} \tag{V-2}$$

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

### V.2.2. Microsegregación

El modelo que se presenta en este capítulo considera, al igual que el desarrollado en el capítulo anterior, la microsegregación del silicio mediante la ley Scheil, que determina el porcentaje de soluto en el líquido suponiendo difusión nula en el sólido y composición uniforme en el líquido

$$Si = Si_0 (1 - f_s)^{k_{si}-1} \tag{V-3}$$

donde  $Si_0$  es el porcentaje de silicio inicial y  $f_s$  es la fracción sólida.

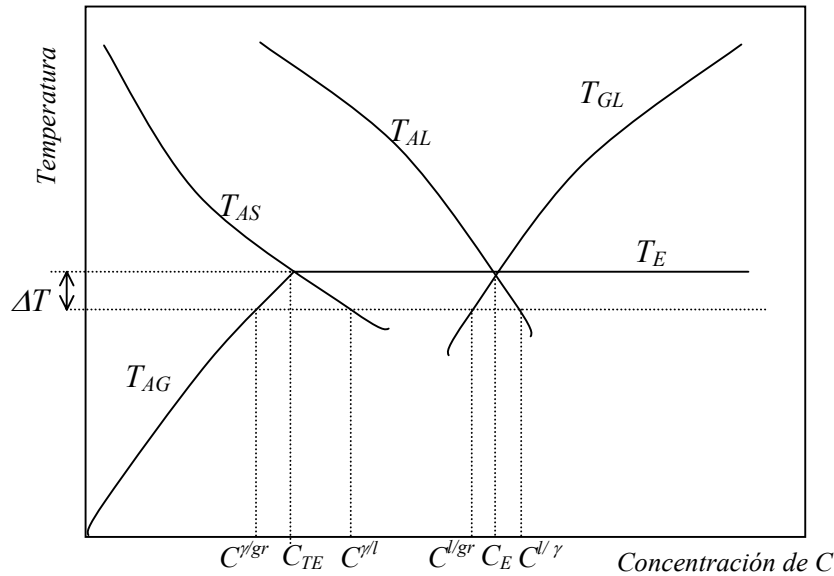


Figura V-1: Esquema de la región eutéctica de un diagrama un Fe-C-Si para un determinado porcentaje de Si.

### V.2.3. Nucleación del grafito

Se utiliza una ley de nucleación continua exponencial [6]:

$$\dot{N} = b\Delta T \exp\left(-\frac{c}{\Delta T}\right) \quad (\text{V-4})$$

donde  $N$  es el número de nódulos por unidad de volumen,  $b$  y  $c$  son parámetros que dependen de la composición de la fundición y del tratamiento de inoculación a la que el líquido es sometido y  $\Delta T = T_E - T$  es el sobreenfriamiento del líquido. Se considera que la nucleación se detiene cuando comienza la recalcancia, fenómeno que puede ocurrir si la velocidad de generación del calor latente debida al cambio de fase es mayor a la de extracción de calor del elemento que solidifica.

De acuerdo a la ley propuesta, la velocidad de nucleación se mantiene muy baja hasta que se alcanza un determinado subenfriamiento llamado crítico, a partir del cual se produce un gran incremento en la velocidad de aparición de nuevos nódulos. Mediante la variación de los valores de los parámetros  $b$  y  $c$  es posible modificar la cantidad de nódulos que nuclea y también desplazar el sobreenfriamiento crítico. Cambiando de manera apropiada ambos parámetros a la vez se puede lograr un ajuste fino de la ley de nucleación que permite adecuarla a las características de cada composición y tratamiento del líquido.

Para tener en cuenta que la fracción de líquido disminuye, se multiplica la expresión (V-4) por  $(1-f_s)$ , resultando [6]:

$$\dot{N} = b\Delta T \exp\left(-\frac{c}{\Delta T}\right)(1 - fs) \quad (\text{V-5})$$

La nucleación continua da origen a nódulos que aparecen en distintos tiempos durante el enfriamiento, lo que ocasiona diferentes tamaños de grano al final de la solidificación. El almacenamiento de la distribución del tamaño de los nódulos se lleva a cabo a través de dos matrices [6], de las cuales la llamada  $DN(i)$  guarda el número de nódulos por unidad de volumen nucleados en cada paso de tiempo para cada punto, Figura V-2 (a), y la llamada  $RN(i)$  guarda el tamaño que dichos nódulos van tomando a medida que se desarrolla el crecimiento de los mismos, Figura V-2 (b).

$i$	$DN(i)$
1	$N_1$
2	$N_2$
3	$N_3$
...	...
K	$N_k$
...	
$n_{max}$	

(a)

$i$	$RN(i)$
1	$R_{gr\ 1}$
2	$R_{gr\ 2}$
3	$R_{gr\ 3}$
...	...
K	$R_{gr\ k}$
...	
$n_{max}$	

(b)

Figura V-2: (a) Matriz de densidad de nódulos para un punto de Gauss. (b) Matriz de tamaño de nódulos para un punto de Gauss.

Ambas matrices tienen una dimensión máxima  $n_{max}$  inicial que puede o no ser utilizada en su totalidad. Esto depende del tiempo total durante el cual se produzca nucleación y del paso de tiempo  $\Delta t$  elegido. Cuanto más dure la nucleación y más pequeño sea  $\Delta t$  más posiciones de las matrices serán ocupadas, mayor será  $K$ .

A medida que se desarrolla el cálculo y mientras dure el proceso de nucleación se irán incrementado las posiciones no nulas de ambas matrices, los valores de la matriz  $DN$  no cambiarán, pero sí lo harán los de la matriz  $RN$  a medida que se produzca el crecimiento de los radios de los nódulos.

#### V.2.4. Crecimiento de los nódulos de grafito

Según el modelo propuesto, la nucleación y la primera etapa de crecimiento del grafito se dan en contacto directo con el líquido. Posteriormente los nódulos son alcanzados y encapsulados por las dendritas de la austenita.

Para el crecimiento del grafito en contacto con el líquido se usa la ecuación de Zener de crecimiento de una partícula esférica aislada en una matriz de baja supersaturación [6]:

$$R_{gr}^2 = \frac{C^{l/\gamma} - C^{l/gr}}{C_{gr} - C^{l/gr}} \frac{\rho_l}{\rho_{gr}} D_c^l t \quad (\text{V-6})$$

donde  $R_{gr}$  es el radio de la esfera de grafito,  $t$  es el tiempo y  $D_c^l$  el coeficiente de difusión del carbono en el líquido.

Derivando la expresión ( V-6) se obtiene la ecuación de la velocidad de crecimiento del grafito

$$\frac{dR_{gr}}{dt} = \frac{1}{2R_{gr}} \left( \frac{C^{l/\gamma} - C^{l/gr}}{C_{gr} - C^{l/gr}} \frac{\rho_l}{\rho_{gr}} D_c^l \right) \quad (\text{V-7})$$

Se considera que el crecimiento del grafito directamente en contacto con el líquido, se produce hasta que el nódulo tiene un tamaño de 6  $\mu\text{m}$ . A partir de ese momento se supone que el grafito es alcanzado por un brazo de austenita y rodeado por esta, por lo que su crecimiento comienza a producirse por difusión del carbono desde el líquido hacia el grafito a través de la austenita.

Para el crecimiento del grafito en contacto con la austenita se parte de la fórmula utilizada por Wetterfall [79] y por Su [74], que plantea el crecimiento del grafito controlado por la difusión del carbono a través de la austenita en un proceso cuasi-estacionario y que responde a la teoría uninodular

$$\dot{R}_{gr} = \frac{(C^{\gamma/l} - C^{\gamma/gr})}{(C_{gr} - C^{\gamma/gr})} \frac{\rho_{\gamma}}{\rho_{gr}} D_c^{\gamma} \frac{1}{R_{gr} \left( 1 - \frac{R_{gr}}{R_{\gamma}} \right)} \quad (\text{V-8})$$

donde  $R_{\gamma}$  es el radio de la cápsula de austenita (ver Figura V-3).

En el presente trabajo, para tener en cuenta que según la teoría multinodular la austenita no es una envoltura esférica y por lo tanto sólo las porciones más delgadas de la envoltura de austenita que separa al nódulo del líquido contribuirán al crecimiento del grafito por difusión (ver Figura V-4), se afecta la fórmula ( V-8) por un factor de corrección  $0.9(1-f_s)^{2/3}$  con lo cual se disminuye la velocidad de crecimiento.

$$\dot{R}_{gr} = 0.9 \frac{(C^{\gamma/l} - C^{\gamma/gr})}{(C_{gr} - C^{\gamma/gr})} \frac{\rho_{\gamma}}{\rho_{gr}} D_c^{\gamma} \frac{(1-f_s)^{2/3}}{R_{gr} \left( 1 - \frac{R_{gr}}{R_{\gamma}} \right)} \quad (\text{V-9})$$

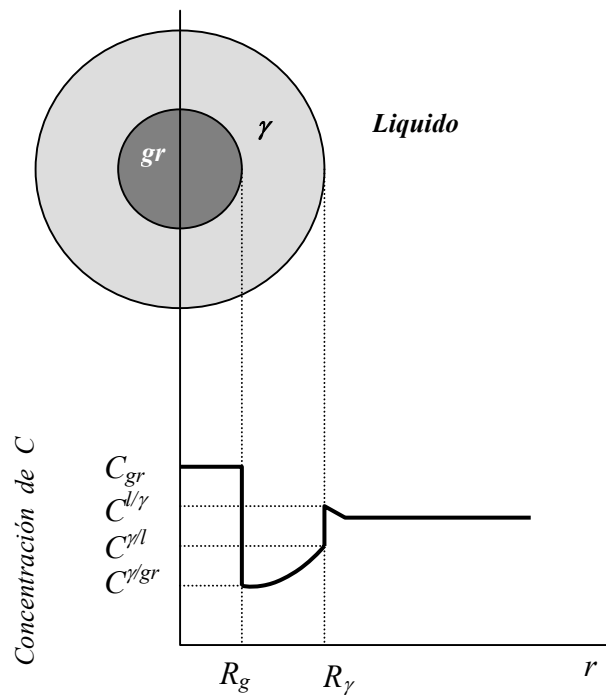


Figura V-3: Distribución de la concentración de carbono en el nódulo de grafito y la cápsula de austenita.

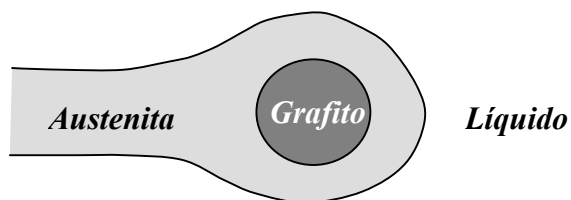


Figura V-4: Nódulo de grafito envuelto por austenita.

Adicionalmente y para ser usada en la ecuación ( V-9), se supone que la relación entre el radio de la austenita y el del grafito  $R_{\gamma}/R_{gr}$  es 1.89 [6]. Este valor, está basado en observaciones experimentales y difiere del valor 2.4 utilizado en el Capítulo IV, resultante de un cálculo realizado considerando que la totalidad de la austenita rodea al núcleo en forma esférica. En el modelo plurinodular la austenita se desarrolla en forma de dendritas y sólo parte de dichas dendritas envuelve al nódulo. Con la relación  $R_{\gamma}/R_{gr}=1.89$  la fórmula de crecimiento resulta:



$$\dot{R}_{gr} = 1.911 \frac{(C^{\gamma/l} - C^{\gamma/gr})}{(C_{gr} - C^{\gamma/gr})} \frac{\rho_{\gamma}}{\rho_{gr}} D_c^{\gamma} \frac{(1 - f_s)^{2/3}}{R_{gr}} \quad (\text{V-10})$$

En este modelo se considera que la relación entre la cantidad de austenita y la cantidad de grafito, *REAG*, se mantiene constante, sin depender del sobreenfriamiento, y está dada por la regla de la palanca aplicada al eutéctico de equilibrio (que varía con el contenido de Si del líquido), resultando:

$$REAG (\%) = \frac{100 - C_E}{C_E - C_{TE}} \quad (\text{V-11})$$

Si la fracción de grafito en un determinado elemento de volumen es

$$f_{gr} = \sum_1^K \frac{4}{3} \pi N_K R_{grK}^3 \quad (\text{V-12})$$

donde el valor de *K* es igual al número de radios de nódulos diferentes que existen en el elemento de volumen debido a que la nucleación no es instantánea, la fracción de austenita se calcula en función de la de grafito como

$$f_{\gamma} = REAG f_{gr} \quad (\text{V-13})$$

y la fracción sólida resulta:

$$f_s = f_{gr} (1 + REAG) \quad (\text{V-14})$$

### V.3. ANÁLISIS DE SENSIBILIDAD DEL MODELO MICROESTRUCTURAL

Se analiza la respuesta del modelo microestructural de nucleación y crecimiento a la variación de la velocidad de enfriamiento y de las constantes de nucleación *b* y *c* (ecuación (V-5)). El cálculo se realiza para un único elemento de fundición, en el que el flujo de calor se considera unidireccional, Figura V-5. La velocidad de extracción del calor se mantiene constante en cada cálculo.

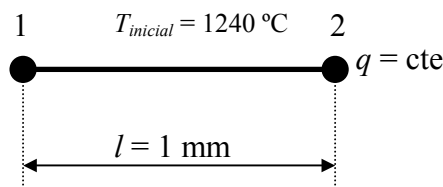


Figura V-5: Elemento unidimensional.

El acoplamiento entre los niveles macro y micromecánico se realiza por medio de la función de cambio de fase, tal como fue comentado en el Capítulo III. 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.

### V.3.1. Influencia del parámetro $b$

En la Figura V-6 se aprecia que, a medida que el valor del parámetro  $b$  aumenta, se produce una disminución tanto del sobreenfriamiento como de la amplitud de la recalcancia. Este comportamiento de las curvas de enfriamiento resulta lógico, ya que al aumentar  $b$ , según la fórmula ( V-5), la velocidad de nucleación de nódulos aumenta para igual sobreenfriamiento y de esta manera el calor latente que se genera equilibra más rápidamente el flujo de calor que se está extrayendo y que, en este caso, es constante.

La velocidad de solidificación determinada por las pendientes de las curvas de la Figura V-7, aumenta al principio de la solidificación y disminuye hacia el final de la misma para todos los valores de  $b$ . Pero, si se tiene en cuenta que el comienzo de la solidificación es igual para las cuatro curvas, es fácil observar que un valor mayor del parámetro  $b$  produce una variación más brusca y temprana de la pendiente de la curva. Se observa que la solidificación termina más tarde a medida que disminuye el valor de  $b$ . Como era de esperarse, la cantidad de nódulos de grafito final en la Figura V-8 (a) aumenta con el aumento del valor de la constante  $b$ , mientras que el máximo valor del radio que alcanzan los nódulos de grafito disminuye, tal como lo muestra la Figura V-8 (b), de lo que se concluye que los valores de  $b$  deben ser aumentados para fundiciones más inoculadas y con mejores tratamientos del líquido.

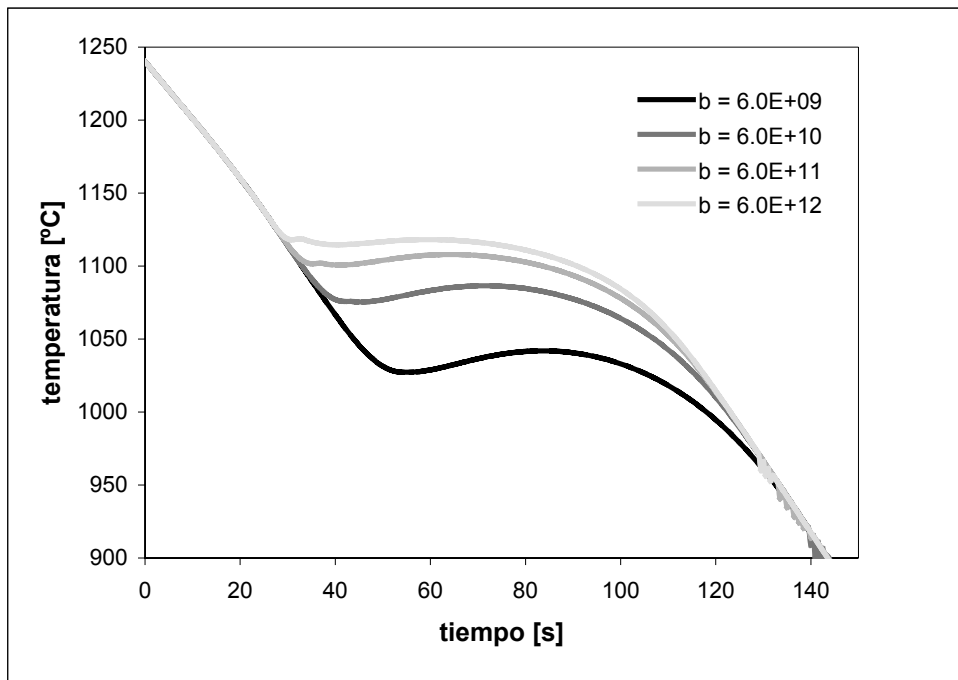


Figura V-6: Curvas de enfriamiento para distintos valores de la constante de nucleación  $b$ .

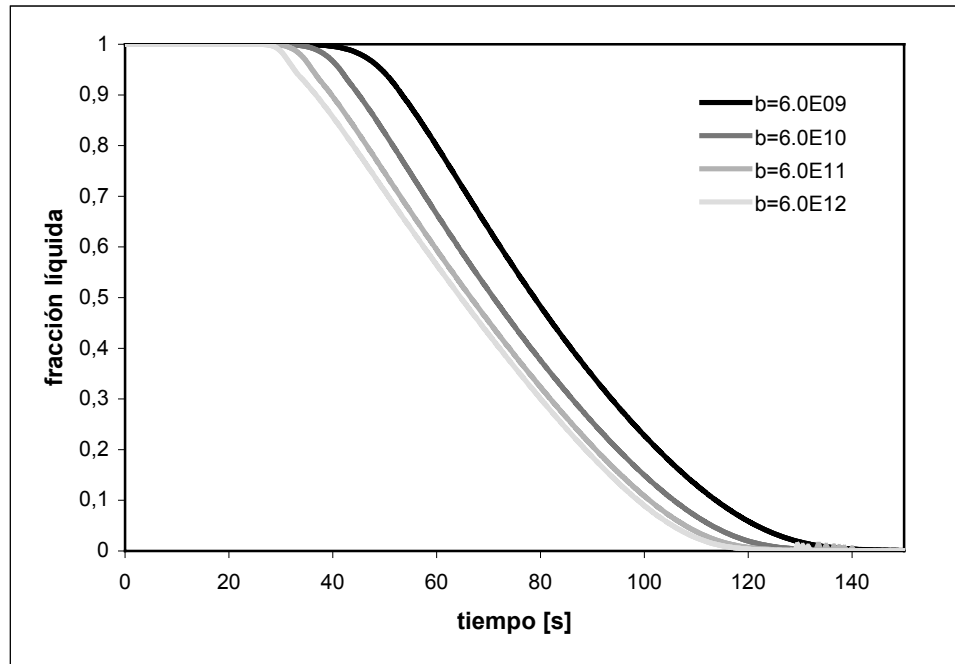


Figura V-7: Evolución de la fracción líquida para distintos valores de la constante de nucleación  $b$ .

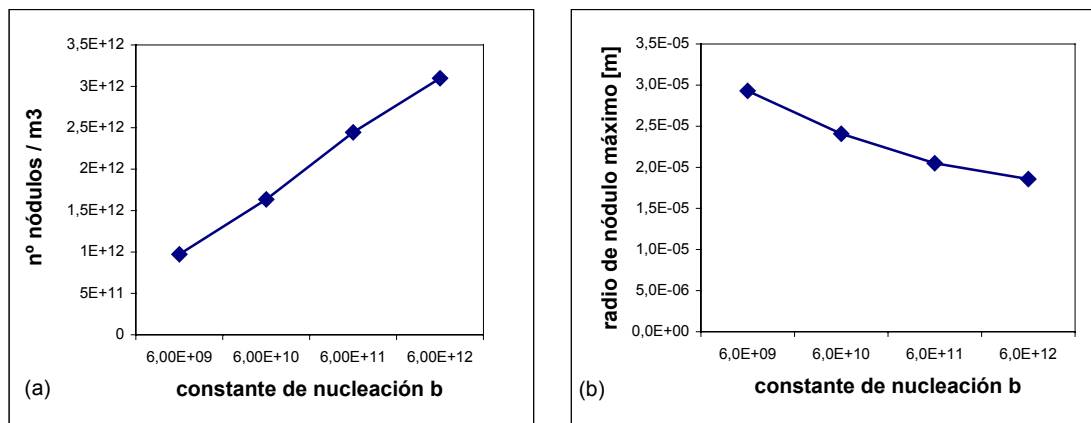


Figura V-8: (a) Conteo nodular para distintos valores de la constante de nucleación  $b$ , (b) Máximo radio de nódulos para distintos valores de la constante de nucleación  $b$ .

### V.3.2. Influencia del parámetro de nucleación $c$

El incremento de la constante de nucleación  $c$ , contrariamente a lo que ocurre con  $b$ , produce un aumento del sobreenfriamiento y de la recalcancia, según puede verse en las curvas de enfriamiento de la Figura V-9. Al variar  $c$  no se producen grandes cambios en el tiempo de solidificación, como se observa en la Figura V-10. La Figura V-11 (a) ilustra cómo un aumento del valor de la constante  $c$  disminuye el número final de nódulos por unidad de volumen produciendo un efecto contrario al que ocasiona un aumento del

parámetro  $b$ . En Figura V-11 (b) se aprecia que el radio máximo de las esferas de grafito aumenta a medida que aumenta la constante  $c$ , es decir a medida que disminuye el número total de nódulos.

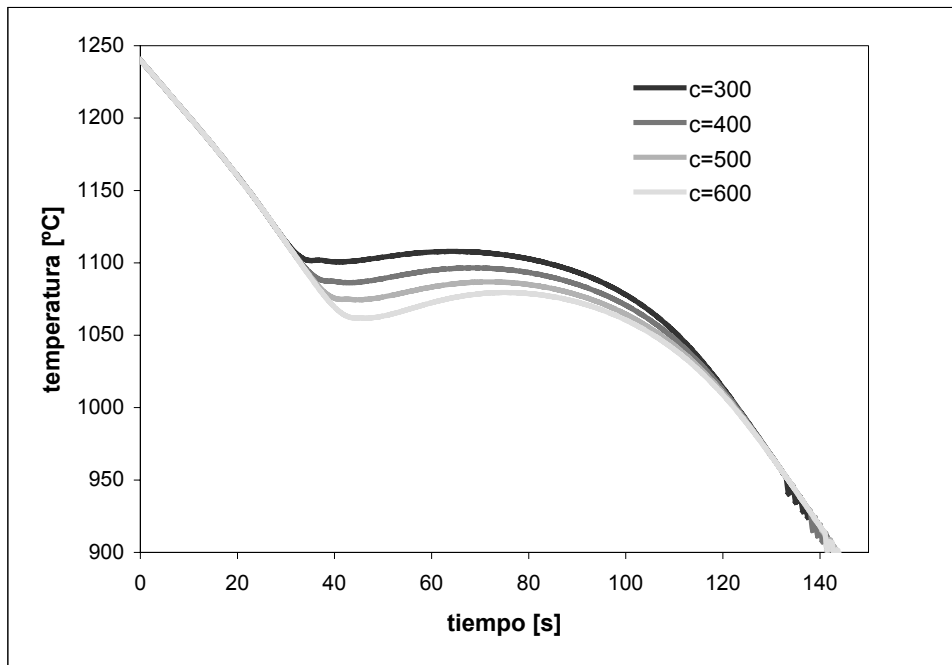


Figura V-9: Curvas de enfriamiento para distintos valores de la constante de nucleación  $c$ .

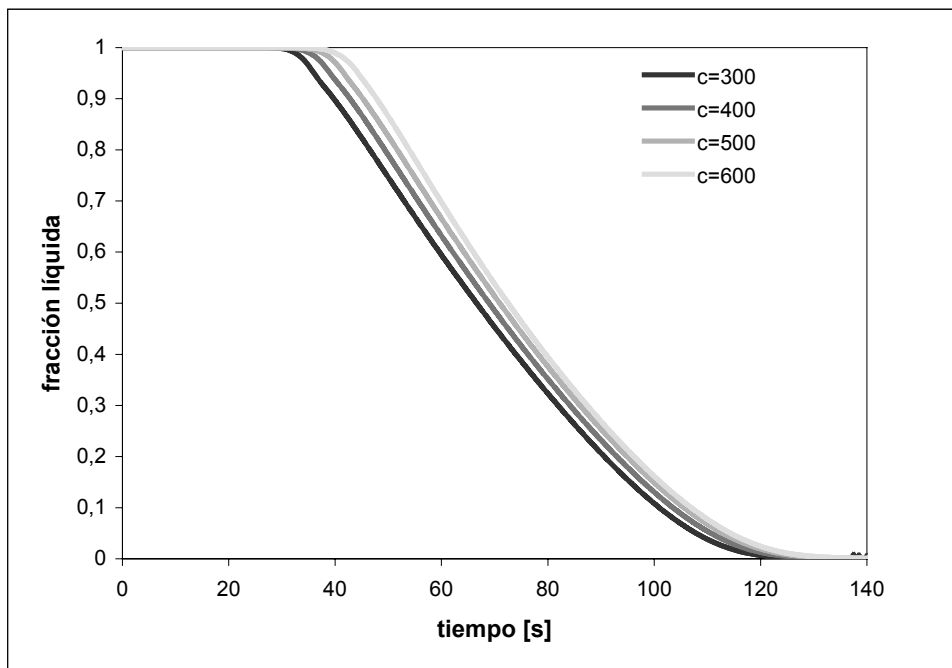


Figura V-10: Evolución de la fracción líquida para distintos valores de la constante de nucleación  $c$ .

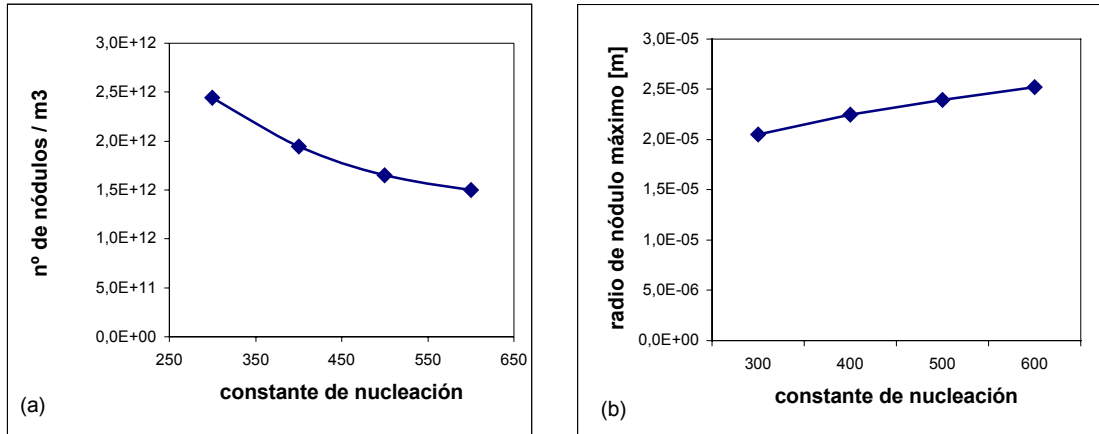


Figura V-11: (a) Conteo nodular para distintos valores de la constante de nucleación  $c$ .  
 (b) Máximo radio de nódulos para distintos valores de la constante de nucleación  $c$ .

### V.3.3. Influencia de la velocidad de enfriamiento

En el presente cálculo, al igual que en el del Capítulo IV, se varía la velocidad de enfriamiento directamente modificando la velocidad de extracción de calor  $q$ . En la Figura V-12 se puede ver cómo, al aumentar  $q$ , aumenta la pendiente de las curvas de enfriamiento y disminuye la longitud de la meseta. El tiempo de solidificación se incrementa a medida que disminuye  $q$ , tal como lo ilustra la Figura V-13. La Figura V-14 (a) muestra que al aumentar la velocidad de enfriamiento aumenta el número de nódulos por unidad de volumen y la Figura V-14 (b) ilustra como disminuye el tamaño máximo de las esferas. Estas tendencias coinciden con resultados experimentales publicados [62].

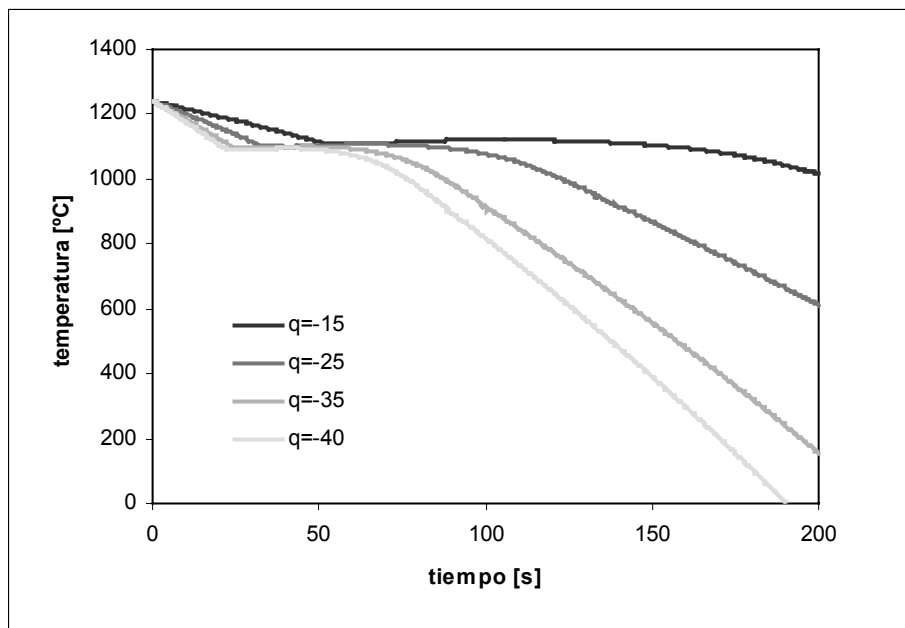


Figura V-12: Curvas de enfriamiento para distintas velocidades de extracción del calor  $q$ .

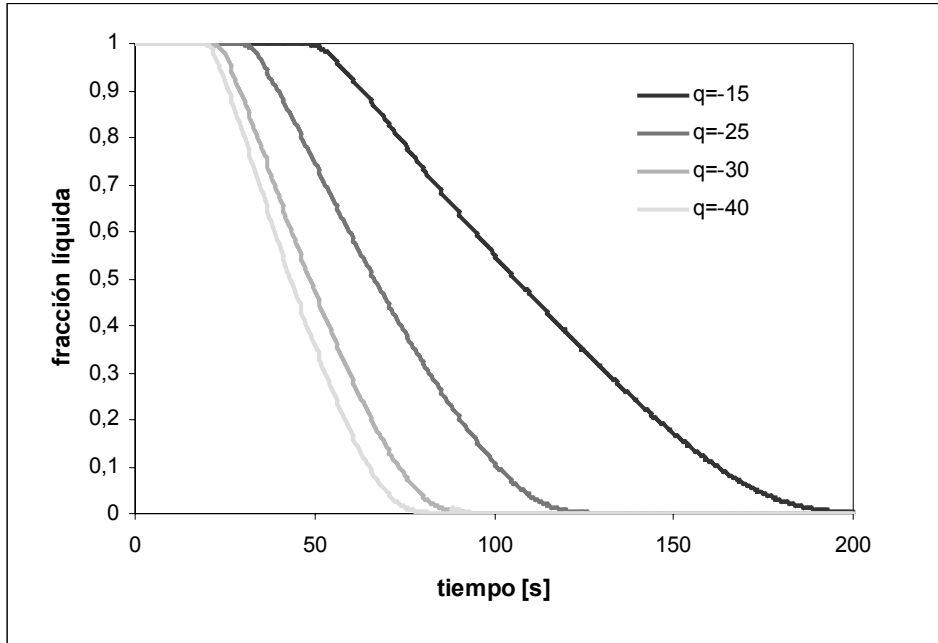


Figura V-13: Evolución de la frac. líq. para distintas velocidades de extracción del calor  $q$ .

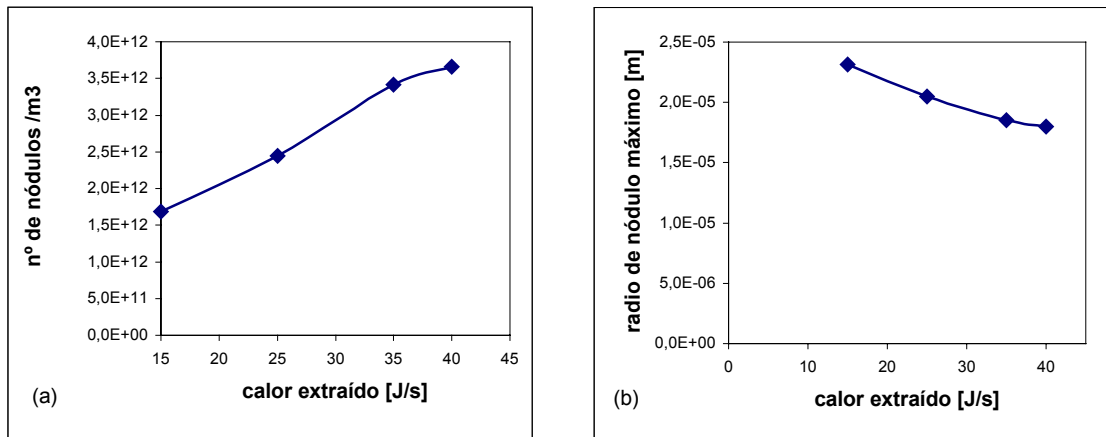


Figura V-14: (a) Conteo nodular para distintas velocidades de extracción del calor  $q$ , (b) Máximo radio de nódulos para distintas velocidades de extracción del calor  $q$ .

## V.4. CONCLUSIONES

En este capítulo se ha presentado un modelo para la simulación numérica de la solidificación de la fundición dúctil siguiendo los postulados de la teoría plurinodular desarrollado por Boeri [6]. En este trabajo, dicho modelo se ha acoplado a la resolución, a nivel macroscópico, de la ecuación de conducción del calor que se resuelve, en su discretización espacial, por el método de los elementos finitos.

Del análisis del comportamiento del modelo frente al cambio de parámetros tales como los parámetros de nucleación  $b$  y  $c$  y la velocidad de enfriamiento  $q$ , se comprobó que los resultados varían de la forma esperada y acorde a lo que ocurre en estudios experimentales. La influencia de  $b$  y  $c$  en las curvas hace que la variación simultánea y adecuada de los dos parámetros de nucleación permita ajustar las características de la nucleación a diferentes tratamientos de la fundición.

El aumento de la velocidad de enfriamiento, que en el análisis se provoca aumentando  $q$ , resulta en una mayor densidad de nódulos más pequeños tal como lo indican los experimentos.





## CAPÍTULO VI

# SIMULACIÓN DE LA SOLIDIFICACIÓN UNINODULAR MEDIANTE EL MÉTODO DE AUTÓMATA CELULAR

### VI.1. INTRODUCCIÓN

Como ya fue comentado en capítulos anteriores, cuando el análisis del proceso de solidificación es puramente macroscópico no es posible predecir parámetros microestructurales determinantes de las propiedades mecánicas del material y para lograrlo es necesaria la formulación de modelos microscópicos.

A escala micromecánica la determinación de la función de cambio de fase  $f_{pc}$  se realiza esencialmente en base a leyes de nucleación y crecimiento de los granos. Cuando el tratamiento del problema se basa en la solución de ecuaciones continuas, como en el caso de los modelos presentados en los capítulos IV y V, es posible obtener resultados promedio relacionados con la microestructura, pero no es posible visualizar el aspecto de la misma.

Uno de los métodos más adecuados para lograr dicha visualización parece ser el de autómatas celulares [80,81], que se ha empleado en algunos problemas de micromecánica de materiales [3,4,47]. Los primeros trabajos de solidificación en esa dirección son los de Gandin y Rappaz [32,33,56] y Stefanescu [54]. Una ventaja de esta metodología es que permite visualizar la forma específica en la que evoluciona la microestructura en un elemento de volumen representativo, identificando formas y tamaños de granos individuales.

En este capítulo se simula el proceso de solidificación equiaxial de una fundición nodular de composición eutéctica mediante la técnica de autómata celular siguiendo la teoría uninodular. El modelo propuesto toma como base las leyes de nucleación y crecimiento planteadas en el Capítulo IV.

La Sección II resume las leyes y condiciones que se han empleado en el modelo. En las Secciones III y IV se presentan generalidades y detalles de la forma en que se ha implementado el algoritmo de autómata celular en este problema. Los resultados para algunos problemas típicos se incluyen en la Sección V.

### VI.2. MODELO MICROESTRUCTURAL DE LA FUNDICIÓN ESFEROIDAL

En este capítulo se analiza la solidificación equiaxial de una fundición nodular de composición eutéctica mediante un modelo basado en la teoría uninodular. Las leyes y

principales hipótesis son las mismas que las empleadas en el Capítulo IV, pero aplicadas en este caso a una simulación mediante autómatas celulares (AC).

### VI.2.1. Composición en las interfases

La determinación de las composiciones de equilibrio se realiza mediante fórmulas que relacionan el contenido de carbono, de silicio y la temperatura [38], tal como se llevó a cabo en los Capítulos IV y V.

En este modelo no se tiene en cuenta la microsegregación del Si, de manera que su porcentaje se mantiene constante, e igual al inicial, en la determinación de las concentraciones de equilibrio de carbono.

### VI.2.2. Nucleación del grafito

Para la nucleación del grafito se utiliza una ley de nucleación continua [74]:

$$\dot{N} = A \cdot \Delta T \quad (\text{VI-1})$$

donde el punto sobre las variables indica derivada temporal,  $N$  es la densidad de nucleación,  $A$  es un parámetro de nucleación que depende de la composición de la fundición y del tratamiento de inoculación al que se somete el líquido y  $\Delta T = T_E - T$  es el sobreenfriamiento del líquido, siendo  $T_E$  la temperatura eutéctica y  $T$  la temperatura a la que se encuentra el líquido. Se considera que la nucleación se detiene cuando comienza la recalcificación.

El crecimiento de los nódulos de grafito se modela según la teoría uninodular y suponiendo que el grafito queda rodeado por una capa de austenita inmediatamente después de nuclear. El crecimiento del grafito en contacto con la austenita se supone controlado por la difusión del carbono a través de la austenita en un proceso cuasi-estacionario [74], en la forma:

$$\frac{dR_{gr}}{dt} = D \frac{\rho_\gamma (C^{\gamma/l} - C^{\gamma/gr})}{\rho_{gr} (C_{gr} - C^{\gamma/gr})} \frac{1}{R_{gr} \left( 1 - \frac{R_{gr}}{R_\gamma} \right)} \quad (\text{VI-2})$$

### VI.2.3. Crecimiento de la envoltura de austenita

Finalmente, para el crecimiento de la esfera de austenita que encapsula al nódulo de grafito se utiliza la expresión propuesta por Su *et al.* [74]

$$\frac{dR_\gamma}{dt} = D \frac{(C^{\gamma/l} - C^{\gamma/gr})}{R_\gamma \left( -1 + \frac{R_\gamma}{R_{gr}} \right) (C^{l/\gamma} - C^{\gamma/l})} \quad (\text{VI-3})$$

Siguiendo las referencias [11, 14], en las ecuaciones ( VI-2) y ( VI-3) se adopta un valor constante para la relación  $R_\gamma/R_{gr} = 2,4$ .

Cuando las expresiones ( VI-1) y ( VI-3) son utilizadas en un modelo determinístico continuo deben afectarse de coeficientes que tengan en cuenta la disminución de la fracción líquida en la primera y la interacción entre los granos de austenita en la segunda tal como se describió en el Capítulo IV en la fórmula (IV-17) y en el Capítulo V en las fórmulas (V-5) y (V-8). En la simulación mediante AC el empleo de dichos coeficientes no es necesario ya que el mismo modelo simula directamente la ubicación y el espacio ocupado por cada grano e impide la superposición de sólido tanto en la nucleación como en el crecimiento.

### VI.3. MODELO DE AUTÓMATA CELULAR

Para modelar la solidificación de una aleación eutéctica de fundición nodular, se usó la técnica de autómatas celulares [80,81], generalmente abreviada como AC. En un AC el dominio en estudio se discretiza usando una grilla regular y en cada celda de la grilla se define 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 que involucran los vectores de estado de las celdas vecinas. La grilla se recorre celda por celda en secuencia, y en cada celda se vuelve a computar el vector de estado. El algoritmo avanza en el tiempo y se van modificando los valores de las celdas.

La simulación mediante AC es un tipo de computación en el que sólo se requiere almacenar la información de una grilla y la implementación de reglas locales para actualizar la información, de manera que los requerimientos de hardware son modestos. En ese sentido pertenece a la misma familia de los métodos de relajación desarrollados por Southwell en la década de 1930.

Las principales características del presente AC son:

- *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 del dominio estudiado.
- *Vecindad.* Es el conjunto de celdas vecinas con las que interactúa una celda específica. En este trabajo se ha adoptado una vecindad conocida como vecindad de Moore, que se ilustra en la Figura VI-1, con algunas modificaciones de ponderaciones que se explicitan más adelante.
- *Determinismo.* Las reglas que fijan el valor de cada celda en cierto momento 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 de la grilla se considere, los estados posibles y las reglas son las mismas.
- *Localidad.* No hay efectos diferidos en el tiempo ni interacciones globales.

A los fines del cálculo, la grilla se representa mediante una matriz. La evolución de nódulos de grafito se representa en una matriz llamada  $W$ , de  $N \times N$  celdas. Las celdas se identifican mediante la fila  $i$ , columna  $j$ , tienen dimensiones de longitud y admiten valores entre 0 (que implica que el material en la celda es totalmente líquido) y el máximo valor admisible en cada celda,  $w_c$  (que implica que la totalidad de la celda es sólida). Otra información que se almacena en una celda es el radio del nódulo de grafito a que pertenece la celda, identificado por  $R_g(i, j)$ .

Cuando el algoritmo se posiciona en una celda  $W(i, j)$  no nula, el cálculo del crecimiento arroja un valor  $\Delta r$ , que se suma al valor inicial de la celda. Cuando esa suma supera el valor límite  $w_c$ , entonces el exceso se asigna a las celdas vecinas usando la vecindad de Moore, pero para el reparto de los residuos se da el valor completo a las celdas en vertical y horizontal y un porcentaje menor a las celdas en diagonal, como se ilustra en la Figura VI-1

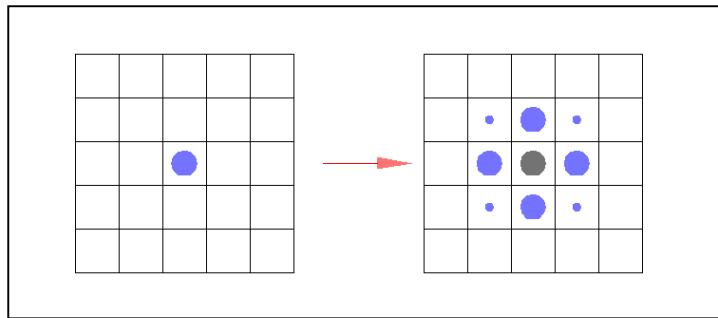


Figura VI-1: Vecindad de Moore utilizada en este trabajo.

Un aspecto original del modelo que se presenta reside en trabajar con dos grillas acopladas de autómatas, una matriz  $W$  para la evolución de nódulos de grafito y otra matriz  $M$  para la evolución de la austenita. Como se indica en la Figura VI-2, las celdas de  $M$  coinciden topológicamente con las celdas de  $W$ . Las celdas de  $M$  permiten visualizar la evolución de las esferas de austenita, y los radios de dichas esferas se guardan en las celdas correspondientes de  $R_a(i, j)$ .

En los autómatas celulares es preciso cuidar que la configuración resultante no dependa del sentido de recorrido por la grilla. Para evitar ese problema, en cada paso de esta implementación se genera una grilla auxiliar  $C_g$  para el grafito, en la que se copia sólo el crecimiento del grafito en ese paso, como se ilustra en la Figura VI-3. El mismo procedimiento se utiliza para el crecimiento de las esferas de austenita, y para la matriz  $M$  se genera una matriz auxiliar  $C_a$ .

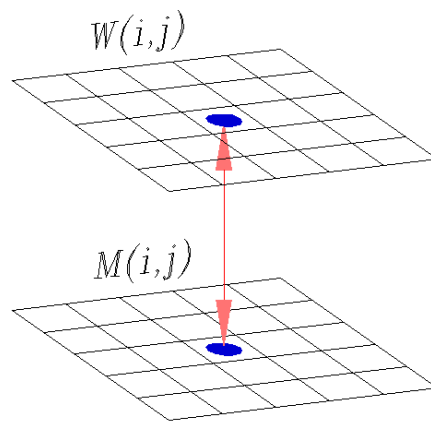


Figura VI-2: Acoplamiento de grillas en un único modelo.

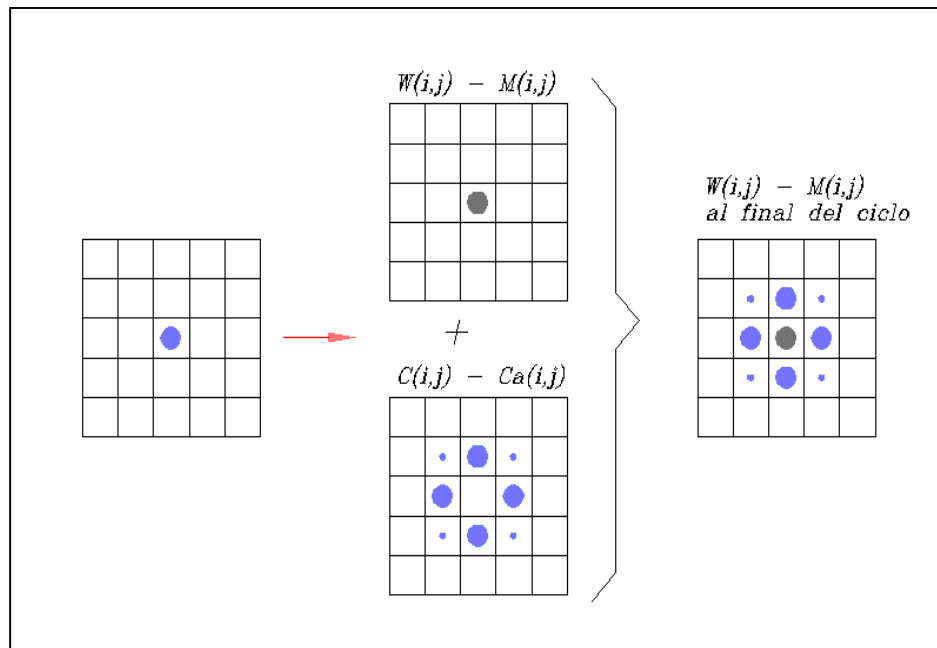


Figura VI-3: Esquema de asignación de incrementos de radio a las celdas vecinas.

## VI.4. ALGORITMO DE AUTÓMATA CELULAR

La Figura VI-4 muestra el diagrama de flujo utilizado para el cálculo.

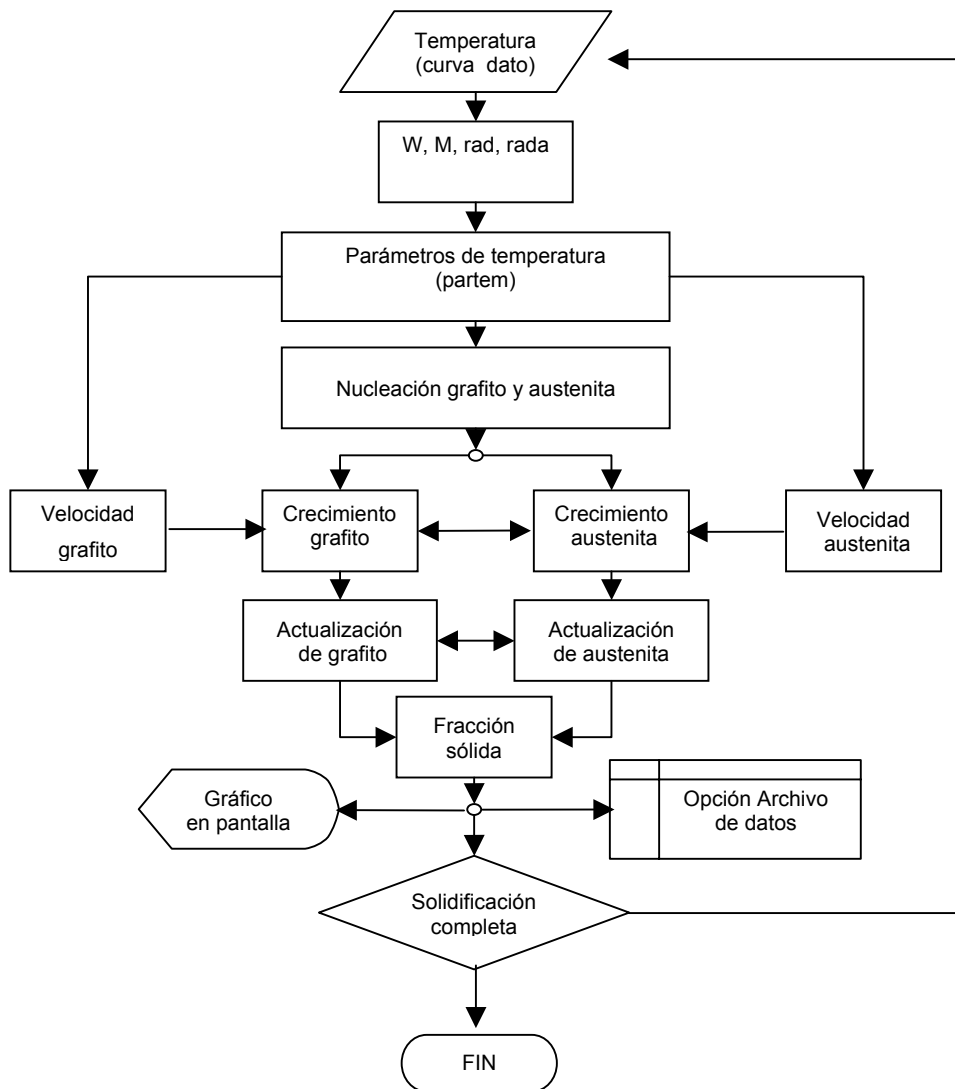


Figura VI-4: Diagrama de flujo de cálculo de la micromecánica. Rad refiere a  $R_g(i, j)$  ; Rada refiere a  $R_a(i, j)$ .

Para la programación del autómata se utilizó un programa base escrito en lenguaje MATLAB, en el que se toman los datos necesarios y se definen las siguientes subrutinas:

*a) Parámetros dependientes de temperatura y/o del contenido de Si.*

Los parámetros dependientes de la temperatura que es necesario calcular en la macromecánica son la temperatura media del intervalo, las concentraciones de carbono en las interfases según condiciones de equilibrio para esa temperatura y la temperatura eutéctica. Los datos más importantes que requiere el AC son:

- Curva de temperatura, que proviene del problema macromecánico;
- 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.

*b) Nucleación de grafito.*

Para la nucleación del grafito el algoritmo procede de la siguiente manera:

- Se verifica si hay recalcificación y si así ocurriera finaliza 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 generan posiciones en la grilla para los nuevos 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.
- A cada nuevo núcleo se le asigna un radio inicial de  $1\mu\text{m}$ .

*c) 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 [74] se considera que la velocidad de crecimiento del grafito es isótropa y dada por la ecuación (VI-2).

*d) Crecimiento de grafito.*

Una vez posicionados en una celda en la cual ya existe grafito ( $W_{ij} \neq 0$ ), y bajo la condición de que dicha celda no haya repartido en pasos de tiempo anteriores ( $D(i,j) = 0$ ), se calcula la velocidad de crecimiento correspondiente, y luego esta velocidad se multiplica por el paso de tiempo  $\Delta t$  para obtener el incremento del radio del nódulo de grafito  $\Delta r$  que se suma a los valores anteriores que había en las celdas  $W(i,j)$  y  $R_g(i,j)$ . En cada elemento de la matriz  $W(i,j)$  se guarda cuánto de la celda se ha cubierto (nunca podrá pasar del valor límite  $w_c$ ) y en la matriz  $R_g(i,j)$  se guarda el radio del nódulo al que

pertenece la celda y que se usará para calcular la velocidad de crecimiento en la próxima iteración. Como las celdas de  $W(i,j)$  tienen un valor máximo (llamado  $w_c$ ), si se supera este valor, el algoritmo computa el residuo ( $\Delta W = W_{i,j} - w_c$ ) y asigna a las direcciones de las celdas vecinas, pero de una matriz auxiliar  $C_g(i,j)$ , el incremento de radio correspondiente ( $\Delta r + \Delta W$ ) mediante una regla de reparto.

Como forma de asignar los valores a la vecindad (y a fin de representar lo mejor posible la forma esférica del grafito), se adoptó el entorno que se conoce como la vecindad de Moore que para cada celda incluye las ocho vecinas, modificada de tal manera que en las direcciones principales (horizontal y vertical) se asigna el 100% del exceso mientras que a las celdas ubicadas en las diagonales se asigna sólo el 33%; esto evita en parte una exagerada deformación de las esferas. La asignación a celdas vecinas descrita no se hace directamente en la matriz  $W$ , porque si así fuera se introducirían errores al continuar con el recorrido de las celdas, ya que se encontrarían celdas ocupadas,  $W(i,j) \neq 0$ , pero por asignaciones debidas al crecimiento de otras celdas ocurrido en el presente paso de tiempo y a las celdas que han sido asignadas en un paso tiempo no se les debe aplicar el algoritmo de crecimiento en el mismo paso de tiempo. Para evitar este inconveniente las asignaciones a las celdas vecinas se realizan en las posiciones correspondientes de una matriz  $C_g$ , como se ilustra en la Figura VI-3. Al finalizar con el recorrido de la matriz  $W$ , ésta se actualiza mediante la suma  $W = W + C_g$ .

*e) Actualización del grafito.*

Puede ocurrir que el valor de incremento de radio que se debe repartir en la vecindad haga alcanzar el valor crítico ( $w_c$ ) en una celda determinada. Para que la representación coincida con el valor del radio total calculado para esa misma iteración, se recorre nuevamente la matriz  $W$  sin calcular nuevos incrementos de radio, al solo efecto de verificar si ha quedado algún valor de celda por encima del valor crítico que no haya asignado incrementos a la vecindad, y si eso ocurre se reparte ese residuo a su vecindad.

*f) Nucleación de austenita.*

En este modelo las posiciones de los centros de las esferas de austenita son directamente asignadas por la posición de los núcleos de grafito, pero el algoritmo se puede generalizar para tratar los modelos en los que la austenita tenga nucleación independiente.

*g) 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 (VI-3).

*h) Crecimiento de la austenita.*

Para la austenita se utiliza un algoritmo de autómatas celular similar al descrito para el grafito. Los incrementos de radio de austenita  $\Delta r_s$  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 controlando, 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 componente más que su homóloga  $W$  (de grafito), en la que se guarda una propiedad de identidad de grano (color) que es transmitida al asignar los valores hacia la vecindad. De manera que la matriz  $M$  tiene tres capas: en la capa 3 se asignan colores a las celdas en forma aleatoria. A la capa 2 se suben los colores de las ubicaciones  $(i, j)$  de cada nucleación; con esto se logra que los distintos granos de austenita posean distintos colores y de esta manera sea posible distinguir los diferentes granos en la graficación.

*i) Actualización de la austenita.*

Para la actualización de la matriz  $M$  se sigue el mismo procedimiento que para la actualización de la matriz  $W$ .

*j) Graficación.*

Para la visualización del estado de la grilla 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.

*k) Cálculo de fracción sólida.*

Para la determinación de la fracción sólida se recorren las matrices  $W$  y  $M$  efectuando un conteo de las posiciones  $(i,j)$  en las que  $W(i,j) \neq 0$  ó  $M(i,j) \neq 0$  al final de cada ciclo. El resultado del conteo es dividido por el número total de celdas ( $N \times N$ ). El valor de esta fracción sólida permite decidir que finaliza la representación cuando la aleación ha solidificado completamente.

Para disminuir el tiempo de cálculo en cada barrido de las matrices se consideran sólo las ubicaciones en las que  $W(i,j) \neq 0$  o  $M(i,j) \neq 0$ , es decir en las que hay algo de sólido. De esta forma no se recorre la matriz completa, sino que se recorre la grilla considerando sólo aquellas celdas que ya han sido asignadas, y se dejan de lado las celdas con valores nulos. Nótese que las reglas a cumplir se imponen celda por celda, y de esta forma se ahorran ciclos de operaciones que no aportan nueva información.

Además, para evitar que una celda que ya asignó a sus vecinas en un paso de tiempo vuelva a hacerlo en otro paso de tiempo, se almacena la posición de dicha celda en la matriz  $D(i,j)$ . Los elementos de dicha matriz pueden valer 1 o 0 e indican si la celda ya asignó o no a sus vecinas. Si el valor es 1 se salta la celda sin realizar ninguna operación de crecimiento, de esa manera se asegura que se está trabajando siempre con las celdas del borde de los nódulos.

Los autómatas del grafito y austenita corren en paralelo y se interrelacionan, por lo que es posible implementar nuevas teorías con sólo modificar las ecuaciones apropiadas. Inclusive se puede cambiar uno de ellos sin afectar el funcionamiento del otro, salvo en los valores de las propiedades relacionadas. Se puede plantear la vinculación de más de dos grillas, sin mayores inconvenientes.

## VI.5. RESULTADOS

Se ha simulado el proceso de solidificación de una fundición nodular en un elemento de volumen representativo. El dominio en estudio se ha considerado bidimensional, y se ha dispuesto un tamaño crítico de celda tal que  $w_c = 5 \mu m$ . El número de celdas adoptado para cada fila y cada columna de la grilla es de  $N = 100$ , lo que produce un número total de 10,000 celdas. Los radios iniciales adoptados para los nódulos del grafito y para las envolturas esféricas de austenita son  $1 \mu m$  y  $1.2 \mu m$  [74] respectivamente.

Se utilizó una curva de enfriamiento que se muestra en la Figura VI-5, obtenida mediante el modelo determinístico continuo presentado en el Capítulo IV. El cálculo se realiza de forma desacoplada, de manera que las temperaturas dadas por la curva de enfriamiento constituyen datos del problema y se suponen independientes de la evolución de la fracción sólida dada por el modelo de AC, siendo el principal propósito del cálculo demostrar la capacidad del método para permitir la visualización de la evolución en el tiempo de la microestructura, identificando formas, ubicaciones y tamaños de granos.

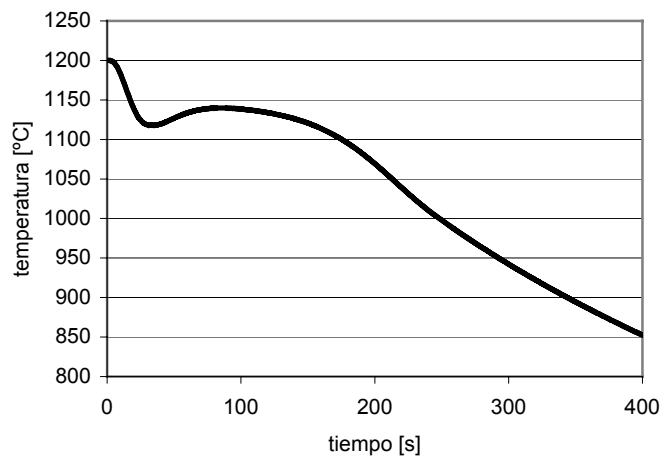


Figura VI-5: Curva de evolución de la temperatura durante el proceso de solidificación.

En la Figura VI-6 se presentan los resultados para diferentes tiempos, a los que corresponden distintos valores de temperatura de la curva dato, usando un valor del parámetro de nucleación  $A=390$ . Los nódulos de grafito se representan en color oscuro y la austenita en distintos tonos de grises. El valor de  $k$  indica el número del paso de tiempo que, en este caso, coincide con el tiempo transcurrido desde el inicio del proceso ya que  $\Delta t = 1$ . Para cada paso de tiempo se indica también la fracción sólida correspondiente.

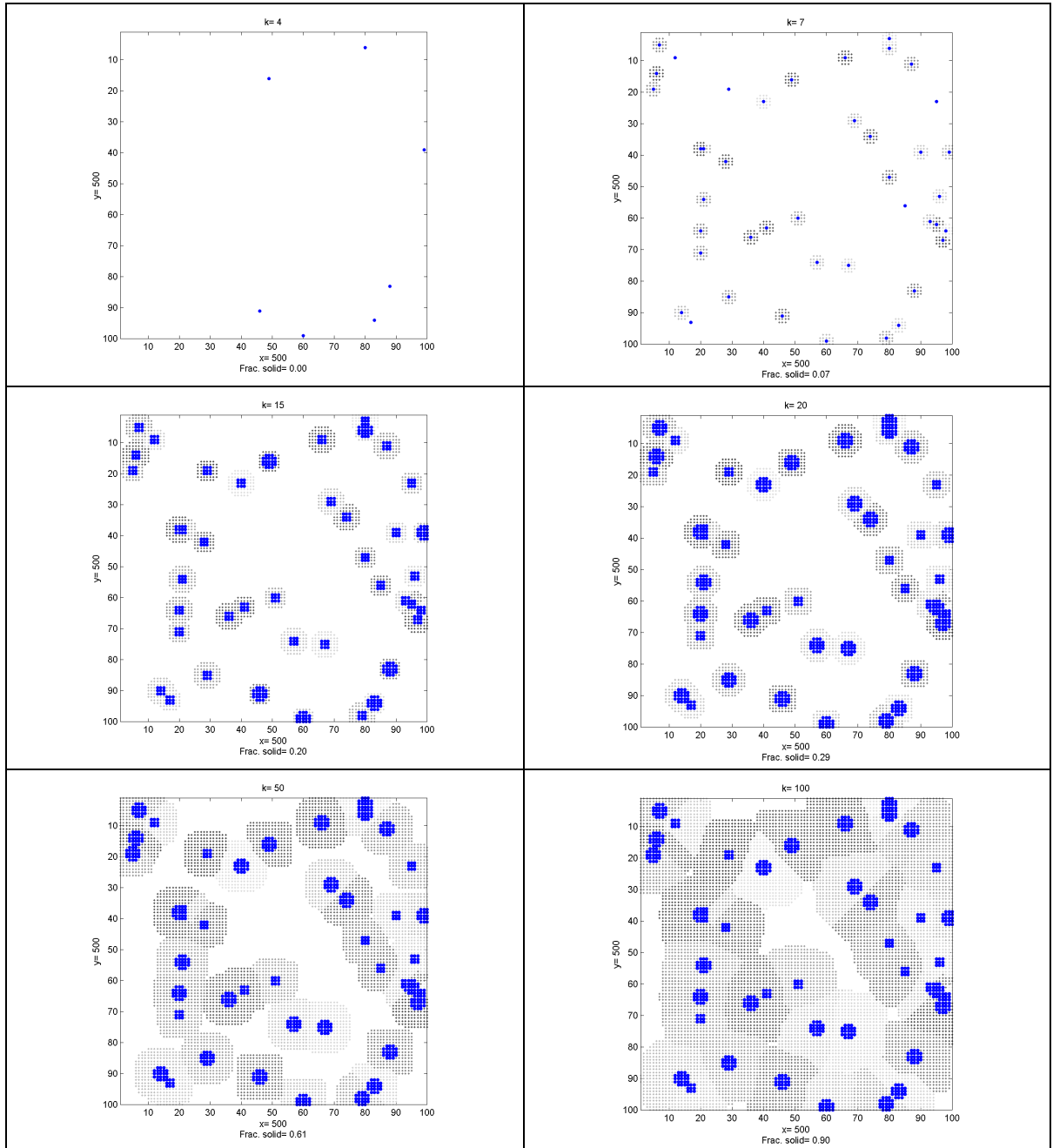


Figura VI-6: Evolución de la microestructura considerando  $A=390$ , para los intervalos 4, 7, 15, 20, 50 y 100.

En la Figura VI-7 puede realizarse una comparación cualitativa entre una micrografía y la microestructura final obtenida mediante el cálculo. La micrografía extraída de Borrajo [8], se seleccionó en base a la densidad final de nódulos que en el cálculo resultó de 168 nod/mm<sup>2</sup>, siendo la de la micrografía de 187 nod/mm<sup>2</sup>. Puede apreciarse una gran similitud en la apariencia de ambas imágenes teniendo en cuenta la distribución y tamaño de los nódulos de grafito. La zona de austenita no es comparable debido a que el material de la micrografía ha sufrido ya la transformación eutectoide.

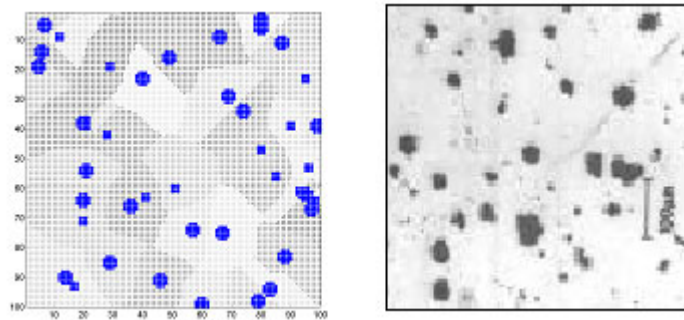


Figura VI-7: Comparación cualitativa de la microestructura obtenida mediante AC y la micrografía obtenida por Borrajo en la referencia 18.

Debido a que la localización de núcleos se hace de manera aleatoria en el elemento de volumen representativo considerado, entonces siempre se generan configuraciones finales diferentes a partir de datos iguales. En la Figura VI-8 se grafican en paralelo los resultados de dos cálculos realizados con los mismos datos. En ocasiones es posible observar pequeñas diferencias en la cantidad final de nódulos de grafito; esto se debe a que el posicionamiento de los núcleos en el algoritmo depende de una función aleatoria y, si en la posición asignada al núcleo por dicha función ya hay sólido, entonces esa nucleación se cancela. Como puede deducirse de las 3 simulaciones de la Figura VI-6 y la Figura VI-8, realizadas con los mismos datos, la fracción sólida obtenida para tiempos iguales en cálculos distintos puede presentar pequeñas diferencias ( y por lo tanto también es diferente el tiempo total de solidificación) debido a que las distintas posiciones de nucleación que se originan en simulaciones diferentes ocasiona distintas condiciones de interacción entre los granos, las cuales pueden determinar mayor o menor velocidad de crecimiento.

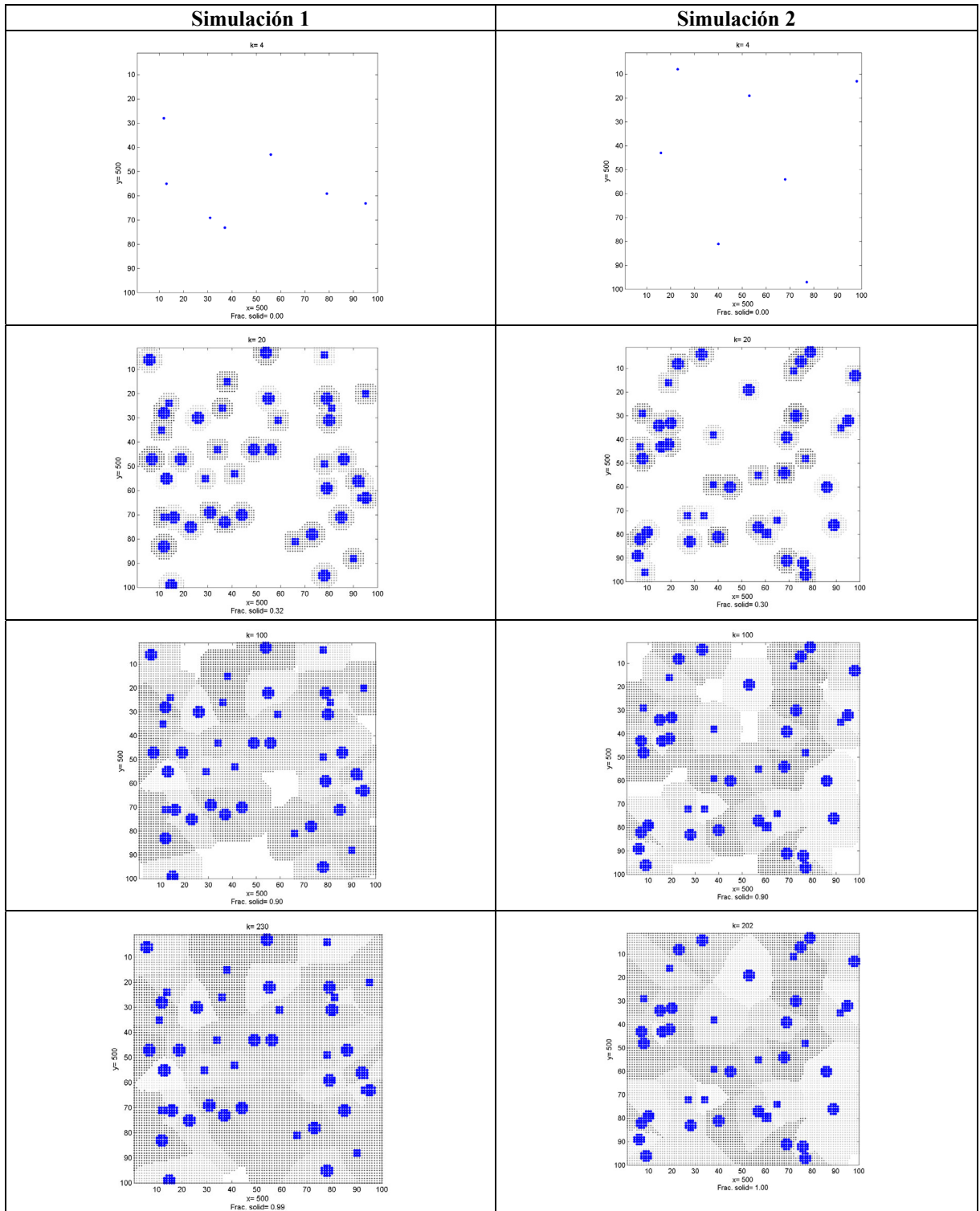


Figura VI-8: Evolución de la microestructura considerando los mismos parámetros de nucleación y crecimiento, pero con nucleación inicial en lugares diferentes.

En la Figura VI-9 se puede ver que la densidad de nódulos resultante en el cálculo,  $168 \text{ nod/mm}^2$ , obtenida para tiempos de solidificación de 183, 202 y 246 segundos en tres simulaciones con datos iguales, entra dentro del rango de los datos experimentales presentados por Borrajo [8].

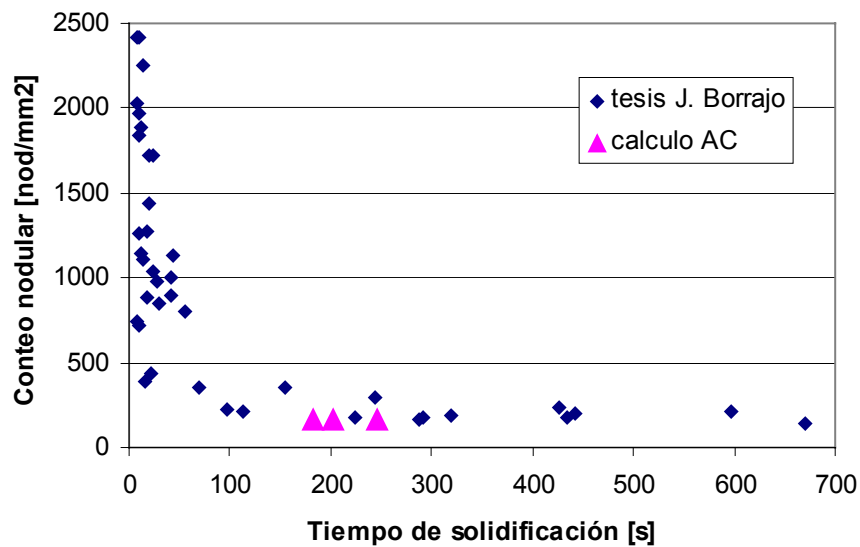


Figura VI-9: Conteo nodular según el tiempo de solidificación. (datos experimentales presentados por Borrajo en Ref. [8]).

Puede observarse que la forma de algunos nódulos tiende a ser cuadrada, esto se puede atribuir a la utilización de la representación de Moore.

En la Figura VI-10 se presentan en paralelo los resultados de dos cálculos realizados con diferentes valores del parámetro de nucleación  $A$ , usado en la ecuación (VI-1) y que indica diferentes tratamientos del líquido. Se observa que para tiempos iguales la fracción sólida y el conteo nodular son mayores en el caso de mayor parámetro de nucleación ( $A=450$ ).

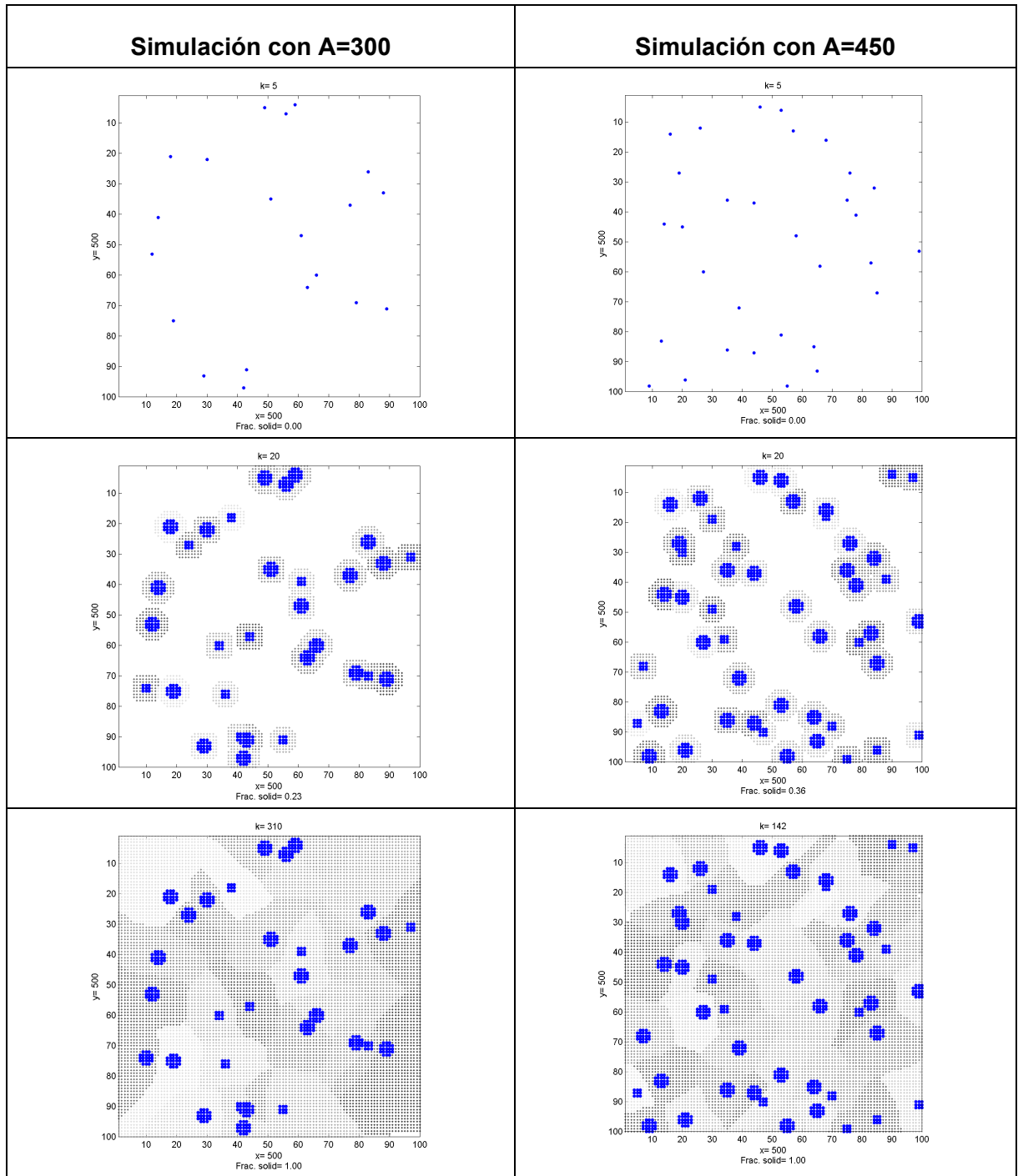


Figura VI-10: Influencia del parámetro de nucleación  $A$  sobre la evolución de la microestructura.

## VI.6. CONCLUSIONES

En este capítulo se ha implementado un modelo para simular la solidificación equiaxial de la fundición de grafito esferooidal, usando una técnica de autómeta celular. El modelo físico adoptado es el de Su *et al.* [74], pero la implementación mediante AC tiene características generales que facilitan la simulación de otros modelos. En particular, el grafito y la austenita se representan de manera separada en dos AC, cada uno abarcando el volumen representativo y 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 temperaturas diferentes, de manera que se representa lo que se vería en un proceso de solidificación. Esto es una ventaja considerable con respecto a modelos fenomenológicos anteriores, en los que las características se obtienen en sentido promedio.

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

Debido a que el modelo contiene asignaciones aleatorias, se comparan resultados de simulaciones 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 nódulos y de tamaños similares, y lo que varía es su posición dentro del elemento de volumen representativo.

La distribución y tamaños de los nódulos de grafito que se pueden visualizar en los resultados obtenidos mediante la técnica de AC muestran una gran similitud con los resultados experimentales.



## *CAPÍTULO VII*

# **NUEVO MODELO MICROESTRUCTURAL DE SOLIDIFICACIÓN DE FUNDICIÓN NODULAR**

### **VII.1. INTRODUCCIÓN**

En el presente capítulo se propone un modelo numérico para la simulación de la solidificación equiaxial de la fundición nodular de composición eutéctica, según la teoría plurinodular. En el mismo se plantea la nucleación instantánea de la austenita, regulada por la velocidad de enfriamiento al momento del comienzo de la solidificación y una nucleación continua del grafito dependiente del tratamiento del líquido y del sobreenfriamiento (esto último implica, indirectamente, una dependencia de la velocidad de enfriamiento). La nucleación del grafito continúa durante toda la solidificación siempre que la temperatura del líquido sea más baja que las temperaturas anteriores. Es decir que, si durante la solidificación se produce recalcancia y la nucleación del grafito se detiene, el que la evolución de la temperatura se revierta y ésta vuelva a descender no es condición suficiente para que la nucleación continúe ya que ésta se reanuda sólo cuando se alcance una temperatura inferior a la que había cuando se inició la recalcancia.

Un aspecto importante de la propuesta consiste en la combinación, en el mismo modelo, del crecimiento dendrítico de la austenita y el crecimiento esférico del grafito, distinguiendo para este último, el que se produce en el líquido interdendrítico del que ocurre en el líquido intergranular. Se considera que los nódulos de grafito dejan de crecer cuando han sido rodeados por la austenita. Se mantiene en todo momento el balance de masa de soluto (carbono). A los fines de simplificar el modelo, los crecimientos de la austenita y del grafito se consideran desacoplados.

La formulación térmica-microestructural que se presenta puede verse como la combinación de dos problemas diferentes e interdependientes: por un lado el “problema macromecánico” regido por la ecuación de la energía, y por otro lado el “problema micromecánico” gobernado por el modelo microestructural. Evidentemente ambos problemas están fuertemente acoplados y, en general, presentan un grado alto de no linealidad.

La resolución de dicha formulación se realiza en forma numérica a través de una discretización espacio-temporal llevada a cabo en el contexto de los métodos de elementos y diferencias finitas, respectivamente [14]. Los problemas macro y microscópico se resuelven en forma fuertemente acoplada en la misma discretización espacio-temporal [14]. En el modelo microestructural, sin embargo, se adoptan en este trabajo ciertas simplificaciones que desacoplan parcialmente las ecuaciones del mismo.

En la Sección VII.2. se describe un modelo de solidificación dendrítica equiaxial propuesto por Rappaz *et al.* [58] cuyos lineamientos principales se utilizan para el crecimiento de la austenita en el modelo microestructural propuesto en la presente tesis. En la Sección VII.3. se describe el nuevo modelo y en la Sección VII.4. se presenta un diagrama de flujo. Las conclusiones se presentan en la Sección VII.5.

## VII.2. CRECIMIENTO DENDRÍTICO EQUIAXIAL. HIPÓTESIS BÁSICAS

El crecimiento dendrítico ha sido analizado y simulado numéricamente a escala microscópica por distintos investigadores, en algunos casos desde un punto de vista determinístico [48,49,58,59,75], analizando promedios en pequeños volúmenes representativos, y en otros casos haciendo consideraciones probabilísticas como por ejemplo empleando la técnica de Autómata Celular (AC) [32,33,34,54,56,57] que presenta la ventaja de la visualización de cada grano pero la desventaja de requerir mayor capacidad computacional que los modelos que analizan promedios. En los modelos que utilizan AC se determina en forma aleatoria la ubicación de los granos y la orientación de las direcciones principales de crecimiento de los granos dendríticos.

En el modelo que se propone en este capítulo para la simulación del crecimiento equiaxial dendrítico de la austenita a nivel microestructural, se adoptan algunas de las principales consideraciones realizadas por Rappaz *et al.* [58,59] que asume que un grano individual de crecimiento equiaxial dendrítico puede ser reemplazado por un grano esférico con una cierta fracción de volumen sólido interior que irá creciendo a medida que avanza la solidificación.

Las principales suposiciones propuestas por Rappaz son:

- La formación de la microestructura está controlada por la difusión del soluto.
- La temperatura en el grano es uniforme por lo que la concentración de carbono de equilibrio en la superficie dendrítica también lo es.
- Composición uniforme del líquido interdendrítico.
- Sin difusión del soluto en el sólido.
- Difusión esférica del soluto en el líquido intergranular.
- Velocidad de crecimiento de las puntas de las dendritas principales dada por la ecuación de la cinética de crecimiento de una dendrita aislada.

En la Figura VII-1 (a) se muestra el esquema de un grano creciendo en forma dendrítica equiaxial. Se señalan el radio total del grano  $R_T$ , calculado en el momento de la nucleación (instantánea), y el radio  $R_g$  que corresponde a una superficie esférica determinada por las puntas de las dendritas principales y que irá creciendo durante la solidificación hasta alcanzar el valor  $R_T$ . En la Figura VII-1 (b) pueden distinguirse tres zonas, determinadas a los fines de realizar una descripción simplificada del perfil de concentración del soluto en función del radio. La *zona 1* muestra la evolución del contenido de soluto en el sólido y ocupa la fracción del volumen total que corresponde al sólido, en la *zona 2* se aprecia la distribución, que se supone uniforme, del carbono en el líquido interdendrítico (esta zona ocupa la fracción del volumen total que corresponde a  $\frac{4}{3} \pi (R_g^3 - R_n^3)$ ) y en la *zona 3* puede verse el perfil de concentración de soluto de la zona

intergranular que, para simplificar, se supone formado por dos partes: una de variación lineal en donde la concentración decrece a medida que crece el radio (capa límite) y otra de concentración uniforme. La zona 3 ocupa la fracción del volumen total que corresponde a  $4/3 \pi (R_T^3 - R_g^3)$ .

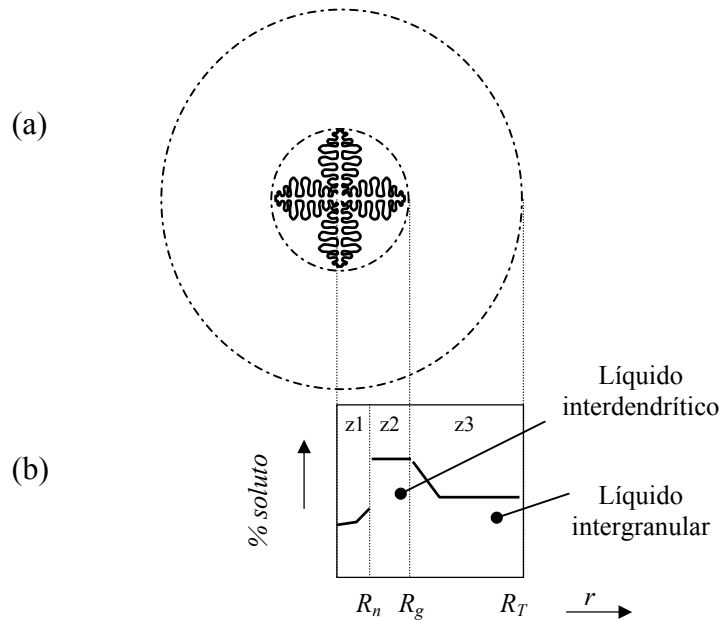


Figura VII-1: (a) esquema de solidificación dendrítica equiaxial. (b) perfil de concentración de soluto.

### VII.3. MODELO MICROESTRUCTURAL DE LA FUNDICIÓN ESFEROIDAL

Se simula la solidificación equiaxial estable de una fundición dúctil de composición eutéctica según la teoría plurinodular. Se supone nucleación independiente de austenita y grafito y, además, crecimiento dendrítico de la austenita y esférico de los nódulos de grafito.

Si bien el crecimiento de la austenita y el del grafito son simultáneos, para simplificar el modelo ambos procesos serán considerados secuenciales y desacoplados. En cada paso de tiempo, mientras se produce el crecimiento de la austenita, se considera constante la cantidad de grafito y cuando se produce el crecimiento del grafito se mantiene constante la cantidad de austenita. Después del crecimiento de cada fase, se recalculan las concentraciones de soluto en el líquido manteniendo siempre el balance de masa.

#### VII.3.1. Concentraciones de equilibrio de carbono en las interfases

En la determinación de las concentraciones de carbono correspondientes al estado de equilibrio para cada temperatura, se tiene en cuenta la influencia del silicio considerando el diagrama de equilibrio ternario Fe-C-Si tal como se explicó en los Capítulos IV y V.

En el cálculo, en cada paso de tiempo (y en cada iteración), una vez que mediante la resolución de la ecuación del calor a nivel macroscópico se obtiene una nueva temperatura, con dicha temperatura y el correspondiente contenido de Si se determinan las nuevas concentraciones de equilibrio  $C^{l/\gamma}$ ,  $C^{\gamma/l}$  y  $C^{l/gr}$  en el punto considerado.

**VII.3.2. Microsegregación del Si**

La concentración de silicio  $Si$ , que influye en las concentraciones de carbono correspondientes al equilibrio de las interfases, se calcula mediante la ley de Scheil. La ley de Scheil resulta de considerar concentración uniforme de Si en el líquido y difusión nula de dicho elemento en el sólido. Ver Capítulos II y IV.

En el cálculo, la nueva concentración de Si se obtiene en cada paso de tiempo (y en cada iteración) en base a la nueva fracción sólida.

**VII.3.3. Cálculo de las fracciones que forman el volumen total del grano eutéctico.**

En la Figura VII-2 (a) puede verse cómo estaría conformado el volumen total del grano, en el caso en que sólo solidificara austenita. Y en la Figura VII-2 (b) puede verse cómo estaría conformado el volumen total del grano en el caso de la solidificación de una fundición de composición eutéctica, en la que además de la austenita creciendo en forma dendrítica existen nódulos de grafito distribuidos en la totalidad del volumen de grano, que es el caso que se modela en este capítulo. En la Figura VII-2 el rectángulo exterior representa la totalidad del volumen del grano, éste se divide en tres zonas, *zona 1* ( $z1$ ), *zona 2* ( $z2$ ) y *zona 3* ( $z3$ ). En el caso de la Figura VII-2 (b), la *zona 1* está compuesta por austenita y grafito ya rodeado de austenita, la *zona 2* por líquido interdendrítico y grafito y la *zona 3* por líquido intergranular y grafito.

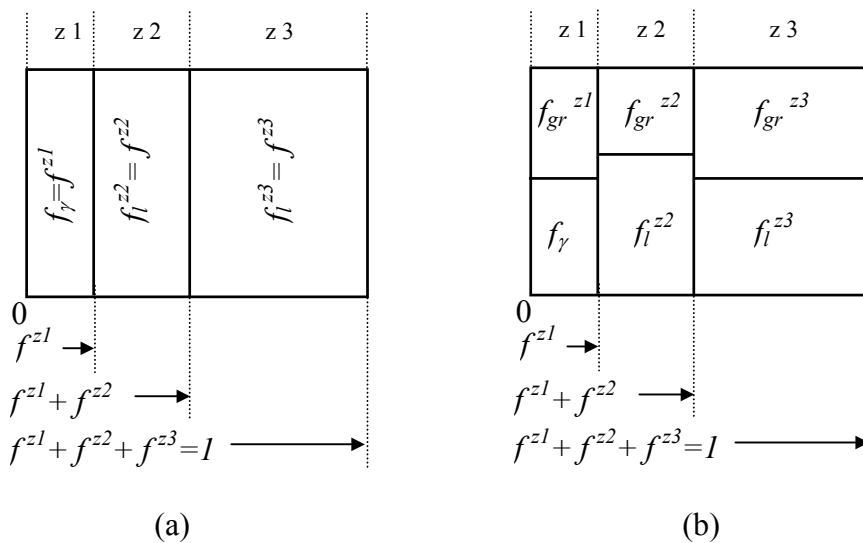


Figura VII-2: (a) fracciones que componen el grano equiaxial dendrítico en la solidificación de una sola fase. (b) fracciones que componen el grano equiaxial dendrítico en la solidificación de la fundición dúctil de composición eutéctica.

Las ecuaciones ( VII-1) a ( VII-4) permiten el cálculo de las fracciones indicadas en la Figura VII-2 (b)

$$\begin{aligned}
 f^{z1} &= \frac{R_n^3}{R_T^3} = f_\gamma + f_{gr}^{z1} \\
 f^{z2} &= \frac{(R_g^3 - R_n^3)}{R_T^3} = f_l^{z2} + f_{gr}^{z2} \\
 f^{z3} &= \frac{(R_T^3 - R_g^3)}{R_T^3} = f_l^{z3} + f_{gr}^{z3}
 \end{aligned}
 \tag{ VII-1}$$

siendo:

$f^{z1}$ : la fracción del volumen total que ocupa la zona 1  
 $f^{z2}$ : la fracción del volumen total que ocupa la zona 2  
 $f^{z3}$ : la fracción del volumen total que ocupa la zona 3

$$\begin{aligned}
 f_\gamma &= \frac{R_n^3}{R_T^3} - f_{gr}^{z1} = f^{z1} - f_{gr}^{z1} \\
 f_g &= \frac{R_g^3}{R_T^3} = f^{z1} + f^{z2}
 \end{aligned}
 \tag{ VII-2}$$

siendo:

$f_g$ : la fracción del volumen total que ocupa la esfera que envuelve al grano de austenita.  
 $f_\gamma$ : la fracción del volumen total que ocupa la austenita.

$$\begin{aligned}
 f_{gr}^{z1} &= \frac{\sum_{j=1}^K N_{gr\ j}^{o\ z1} R_{gr\ j}^{z1\ 3}}{R_T^3} = \frac{4}{3} \pi \sum_{j=1}^K N_{gr\ j}^{z1} R_{gr\ j}^{z1\ 3} \\
 f_{gr}^{z2} &= \frac{\sum_{j=1}^K N_{gr\ j}^{o\ z2} R_{gr\ j}^3}{R_T^3} = \frac{4}{3} \pi \sum_{j=1}^K N_{gr\ j}^{z2} R_{gr\ j}^3 \\
 f_{gr}^{z3} &= \frac{\sum_{j=1}^K N_{gr\ j}^{o\ z3} R_{gr\ j}^3}{R_T^3} = \frac{4}{3} \pi \sum_{j=1}^K N_{gr\ j}^{z3} R_{gr\ j}^3
 \end{aligned}
 \tag{ VII-3}$$

siendo:

$f_{gr}^{z1}$ : la fracción del volumen total que ocupa el grafito de la zona 1 (ya rodeado por austenita).  
 $f_{gr}^{z2}$ : la fracción del volumen total que ocupa el grafito de la zona 2 (interdendrítica).  
 $f_{gr}^{z3}$ : la fracción del volumen total que ocupa el grafito de la zona 3 ( intergranular).

$N_{gr}^{z1}, N_{gr}^{z2}, N_{gr}^{z3}$  : número de nódulos de grafito de *zonas* 1, 2 y 3, respectivamente, por unidad de volumen total de grano.

$N_{gr}^{o z1}, N_{gr}^{o z2}, N_{gr}^{o z3}$  : número de nódulos de grafito de *zonas* 1, 2 y 3 respectivamente.

La fracción sólida puede expresarse como lo indica la siguiente fórmula

$$\begin{aligned} f_s &= f_\gamma + f_{gr}^{z1} + f_{gr}^{z2} + f_{gr}^{z3} \\ &= f^{z1} + f_{gr}^{z2} + f_{gr}^{z3} \end{aligned} \quad (\text{VII-4})$$

En el desarrollo del análisis numérico del proceso de solidificación, las fracciones mencionadas en este punto se recalculan, algunas varias veces, en cada paso de tiempo. Por ejemplo, las fracciones de grafito por zona  $f_{gr}^{zn}$ , sufren variaciones no sólo con el crecimiento de los nódulos sino también cuando, por el crecimiento de los radios  $R_n$  y  $R_g$ , se modifica el número de nódulos de cada zona, tal como se verá más adelante.

#### VII.3.4. Cálculo de un paso de tiempo modificado $\Delta t^*$

La resolución de la ecuación del calor en el tiempo se realiza numéricamente utilizando un paso de tiempo  $\Delta t$  que es dato del problema y se mantiene constante durante todo el cálculo. El mismo paso de tiempo  $\Delta t$  es utilizado en todo el análisis microestructural, salvo cuando la temperatura desciende por primera vez por debajo de la temperatura eutéctica  $T_E$ . Cuando esto ocurre, la temperatura pasa en un  $\Delta t$  del valor  ${}^{t-1}T$  al valor  ${}^tT$  tal como puede verse en la Figura VII-3. En las fórmulas del modelo microestructural en las que, por existir una derivada temporal, interviene el paso de tiempo  $\Delta t$ , tales como las fórmulas de nucleación y crecimiento, es necesario modificar el valor del  $\Delta t$  establecido como dato del problema por un valor  $\Delta t^*$  que indique el tiempo que pasó desde que la temperatura tenía el valor  $T_E$  hasta que alcanzó el valor  ${}^tT$ . Este cambio se realiza sólo en el modelo microestructural y sólo para el paso de tiempo mencionado. Si el cambio de paso de tiempo no se hiciera, en el cálculo se obtendría una cantidad y tamaño de nódulos mayores en el comienzo de la solidificación.

Según puede verse en la Figura VII-3 una forma de aproximar el valor de  $\Delta t^*$  es mediante la fórmula (VII-5)

$$\begin{aligned} \frac{{}^{t-1}T - {}^tT}{\Delta t} &= \frac{T_E - {}^tT}{\Delta t^*} \\ \Delta t^* &= \frac{(T_E - {}^tT)\Delta t}{{}^{t-1}T - {}^tT} \end{aligned} \quad (\text{VII-5})$$

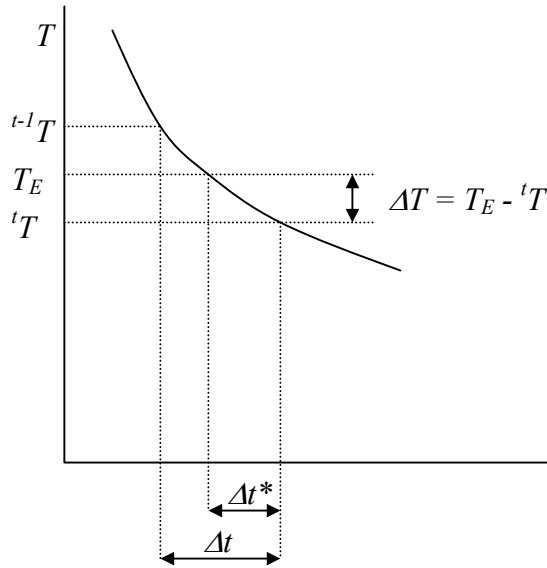


Figura VII-3: determinación del paso de tiempo modificado.

### VII.3.5. Nucleación y tamaño de grano de la austenita eutéctica

Se considera que la nucleación de la austenita es instantánea y se produce cuando se alcanza la temperatura eutéctica  $T_E$ . Es decir que la nucleación de la austenita se calcula una sola vez para cada punto (volumen representativo).

Las pruebas experimentales demuestran que, cuando la velocidad de enfriamiento es mayor, aumenta el número de granos [62,63], esto es debido probablemente a que se alcanza un mayor sobreenfriamiento ( $\Delta T = T_E - T$ ), lo contrario ocurre para velocidades de enfriamiento menores. Dado que se modela una nucleación instantánea de la austenita, no es posible expresar la densidad de grano en función del sobreenfriamiento, por lo tanto se propone, como una aproximación, una función lineal de la velocidad de enfriamiento que se produce en el paso de tiempo en que la temperatura desciende por debajo de  $T_E$ .

$$N_\gamma = A \frac{dT}{dt} \tag{VII-6}$$

siendo  $N_\gamma$  la densidad de granos de austenita (nº granos por unidad de volumen) y  $A$  un parámetro que depende de las características del tratamiento del líquido, en relación con aquellos parámetros que intervienen en la cantidad de granos que se obtienen, tales como inoculación, tiempo que transcurre desde que se realiza la inoculación hasta que se procede a la colada, etc.

Dado que se simula una solidificación de tipo equiaxial, por simplicidad se considerará que la forma final de los granos es esférica y de radio  $R_T$ .

En base a la cantidad de granos de austenita que nuclean por unidad de volumen, se determina el radio total final  $R_T$  de los mismos en cada punto, considerándose constante

durante todo el proceso. En cada volumen representativo encontraremos un solo tamaño de grano de austenita cuyo radio está dado por la fórmula

$$R_T = \sqrt[3]{\frac{3}{4\pi N_\gamma}} \quad (\text{VII-7})$$

Si bien el volumen de un grano puede establecerse con la fórmula ( VII-7), no es cierto que los granos sean esferas perfectas de radio  $R_T$  ya que, si así fuera, se producirían zonas de interferencia y/o zonas vacías. Ver Figura VII-4.

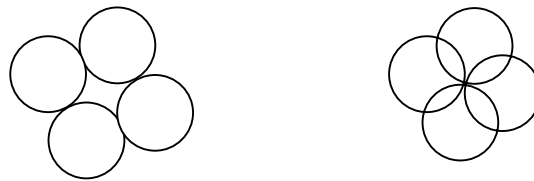


Figura VII-4: Interacción entre granos.

Suponiendo que los granos son esferas perfectas de radio  $R_T$ , calculado con la fórmula ( VII-7), se asegura la consideración exacta de todo el volumen, sin embargo, no se tiene en cuenta la interferencia de las esferas entre sí, que podría producir una disminución de la velocidad de crecimiento en los puntos en los que ocurre la interacción. De todos modos se debe tener en cuenta que la interferencia no se produce necesariamente al mismo tiempo en todos los puntos de la superficie externa de la esfera y que, además, los granos no son esferas sólidas sino que crecen de manera dendrítica.

### VII.3.6. Nucleación de los nódulos de grafito

La nucleación del grafito se simula continua, por lo que en cada paso de tiempo  $\Delta t$ , si se cumple que:

- la temperatura está por debajo de la temperatura eutéctica y es menor que la menor temperatura alcanzada desde que comenzó la solidificación,
- la fracción líquida aún no es igual a cero,

nucleará un conjunto de nódulos con una determinada densidad  $N_{grj}$ , siendo  $j$  el índice que indica de qué conjunto de nucleación se trata. Parte de los nódulos nuclearán en el líquido interdendrítico de la *zona 2* ( $R_n < r < R_g$ ) y parte en el líquido intergranular de la *zona 3* ( $r > R_g$ ). Cada vez que un grupo de nódulos nuclea, se establece su distribución entre las dos zonas, salvo en el primer paso de tiempo en el que la temperatura desciende por debajo de la eutéctica, que es en el que también nuclea la austenita, y en el que, por no existir aún la *zona 2*, la totalidad de los nódulos estarán ubicados en la *zona 3*.

Para la nucleación del grafito se usará la siguiente fórmula exponencial [6]



$$\frac{\partial N_{gr}}{\partial t} = b\Delta T \exp\left(-\frac{c}{\Delta T}\right)(1-f_s) \quad (\text{VII-8})$$

donde  $b$  y  $c$  son parámetros que toman valores específicos para una determinada composición y tratamiento del líquido. El factor  $(1-f_s)$ , donde  $f_s$  es la fracción sólida, permite tener en cuenta la disminución de la fracción líquida, esto es importante ya que la densidad está expresada con respecto al volumen total.

En el algoritmo de cálculo la nucleación continua, que da origen a nódulos que aparecen en distintos tiempos durante el enfriamiento, ocasiona diferentes tamaños de los mismos al final de la solidificación. El almacenamiento de la distribución del tamaño de los nódulos se lleva a cabo a través de tres matrices:

- $DN(j,i)$ , guarda el número de nódulos por unidad de volumen de cada zona, ver Figura VII-5 (a). La zona se indica con el subíndice  $i=1,2,3$ . La cantidad de filas ocupadas  $K$  de la matriz  $DN$  aumenta en una unidad cada vez que se produce una nueva nucleación y se agrega un nuevo grupo o familia de nódulos. El valor de los elementos de la matriz  $DN$  cambia en cada paso de tiempo debido a la modificación del volumen ocupado por cada zona, lo que ocasiona que los nódulos, que se consideran inmóviles, pertenezcan a diferentes zonas a lo largo de la solidificación.
- $RN(i)$ , guarda el tamaño que los nódulos de los distintos grupos  $j$  van tomando a medida que se desarrolla el crecimiento de los mismos en las zonas 2 y 3, Figura V-2 (b). Si bien en las zonas 2 y 3 las velocidades de crecimiento de los nódulos son distintas, debido a que la concentración de carbono del líquido de cada zona es diferente (como se verá más adelante), para cada grupo se calcula una velocidad promedio, de manera que en la matriz  $RN(i)$  sólo se guarda un tamaño de radio para cada grupo.
- $RNZ1(i)$ , guarda el tamaño que los nódulos de los distintos grupos  $j$  tienen en la zona 1. Estos valores van cambiando a medida que parte de los nódulos de cada grupo ubicados en la zona 2 van pasando a la zona 1 como puede verse en la fórmula (VII-36).

$j$	$DN(j,1)$	$DN(j,2)$	$DN(j,3)$	$j$	$RN(j)$	$j$	$RNZ1(j)$
1	$N_{gr}^{z1}{}_1$	$N_{gr}^{z2}{}_1$	$N_{gr}^{z3}{}_1$	1	$R_{gr}{}_1$	1	$R_{gr}^{z1}{}_1$
2	$N_{gr}^{z1}{}_2$	$N_{gr}^{z2}{}_2$	$N_{gr}^{z3}{}_2$	2	$R_{gr}{}_2$	2	$R_{gr}^{z1}{}_2$
3	$N_{gr}^{z1}{}_3$	$N_{gr}^{z2}{}_3$	$N_{gr}^{z3}{}_3$	3	$R_{gr}{}_3$	3	$R_{gr}^{z1}{}_3$
...	...	...	...	...	...	...	...
K	$N_{gr}^{z1}{}_K$	$N_{gr}^{z2}{}_K$	$N_{gr}^{z3}{}_K$	K	$R_{gr}{}_K$	K	$R_{gr}^{z1}{}_K$
...				...		...	
$n_{max}$				$n_{max}$		$n_{max}$	

(a)
(b)
(c)

Figura VII-5: (a) Matriz de densidad de nódulos para un punto de Gauss. (b) Matriz de tamaños de nódulo para zonas 2 y 3 para un punto de Gauss. (c) Matriz de tamaños de nódulo para zona 1 para un punto de Gauss.

A las tres matrices se les asigna una dimensión máxima  $n_{max}$  inicial que puede o no ser utilizada en su totalidad. Esto depende del tiempo total durante el cual se produzca nucleación y del paso de tiempo  $\Delta t$  elegido. A medida que se desarrolla el cálculo y mientras dure el proceso de nucleación se irán incrementando las posiciones no nulas de las tres matrices. Cuanto más dure la nucleación y más pequeño sea  $\Delta t$  más posiciones de las matrices serán ocupadas y, por lo tanto, mayor será  $K$ .

Los nódulos de grafito nuclean en las zonas líquidas del grano y, cuando esto ocurre, para el nuevo grupo de nódulos  $K$  se verifica que

$$N_{gr\ K}^{\circ} = N_{gr\ K}^{\circ\ z2} + N_{gr\ K}^{\circ\ z3} \quad (\text{VII-9})$$

siendo  $N_{gr\ K}^{\circ}$  el número total de nódulos que nuclea,  $N_{gr\ K}^{\circ\ z2}$  el número de nódulos que nuclea en el líquido interdendrítico (líquido de la zona 2) y  $N_{gr\ K}^{\circ\ z3}$  el número de nódulos que nuclea en el líquido exterior o intergranular (líquido de la zona 3).

Dado que el número de nódulos es igual a la densidad de nódulos multiplicada por el volumen total del grano, se puede expresar que la densidad total de nódulos correspondiente al grupo de nucleación  $K$ , en el momento de la nucleación, es igual a la suma de las densidades de nódulos de la zona 2 y de la zona 3 en el mismo instante de nucleación y para al mismo grupo  $K$ , según lo expresa la ecuación (VII-10).

$$\begin{aligned} N_{gr\ K} \times V_T &= N_{gr\ K}^{z2} \times V_T + N_{gr\ K}^{z3} \times V_T \\ N_{gr\ K} &= N_{gr\ K}^{z2} + N_{gr\ K}^{z3} \end{aligned} \quad (\text{VII-10})$$

Usando la ley de nucleación de la fórmula (VII-8) y desarrollando

$$\begin{aligned} b\Delta T \exp\left(\frac{-c}{\Delta T}\right)(1-f_s)\Delta t &= b\Delta T \exp\left(\frac{-c}{\Delta T}\right)(f_i^{z2} + f_i^{z3})\Delta t \\ &= b\Delta T \exp\left(\frac{-c}{\Delta T}\right)f_i^{z2}\Delta t + b\Delta T \exp\left(\frac{-c}{\Delta T}\right)f_i^{z3}\Delta t \end{aligned} \quad (\text{VII-11})$$

la distribución de las nuevas nucleaciones puede expresarse por las siguientes fórmulas

$$\begin{aligned} N_{gr\ K}^{z2} &= \left[ b\Delta T \exp\left(\frac{-c}{\Delta T}\right)(1-f^{z1} - f_{gr}^{z2} - f^{z3})\Delta t \right]_K \\ N_{gr\ K}^{z3} &= \left[ b\Delta T \exp\left(\frac{-c}{\Delta T}\right)(1-f^{z1} - f^{z2} - f_{gr}^{z3})\Delta t \right]_K \end{aligned} \quad (\text{VII-12})$$

Cabe aclarar que la distribución de los nódulos de grafito de un determinado grupo  $j$  que en el momento de la nucleación se realiza entre las zonas 2 y 3, verificándose las igualdades (VII-9) y (VII-10), en pasos posteriores, cuando ya se ha producido el crecimiento de las zonas 1 y 2, se distribuyen entre las tres zonas del grano eutéctico de manera que se verifica

$$\begin{aligned} N_{gr\ j} \times V_T &= N_{gr\ j}^{z1} \times V_T + N_{gr\ j}^{z2} \times V_T + N_{gr\ j}^{z3} \times V_T \\ N_{gr\ j} &= N_{gr\ j}^{z1} + N_{gr\ j}^{z2} + N_{gr\ j}^{z3} \end{aligned} \quad (\text{VII-13})$$

En el modelo propuesto en este capítulo, a diferencia de los anteriormente tratados, no se supone que la nucleación de los nódulos de grafito termina cuando se produce recalcancia, es decir cuando la temperatura aumenta durante la solidificación. Dado que en el nuevo modelo se considera la nucleación independiente e instantánea de la austenita es posible que se produzcan pequeñas recalcancias muy pronto en el proceso de solidificación y esto, numéricamente, puede ocasionar la inmediata interrupción de la nucleación del grafito en valores de densidad aun muy bajos. Por otro lado algunos investigadores sostienen [74,79], basados en la distribución de tamaño de nódulo observada experimentalmente, que es posible que la nucleación del grafito se produzca aún después de la recalcancia.

### VII.3.7. Crecimiento de la austenita eutéctica

En un modelo en el que crece sólo austenita, el perfil de concentración de carbono se vería tal como lo muestra la Figura VII-1 (b), sin embargo, si se considera la solidificación del eutéctico de fundición nodular y se tienen en cuenta los nódulos de grafito distribuidos en el volumen del grano, el perfil de soluto podría esquematizarse como se ve en la Figura VII-6 (a), en la que la concentración presenta discontinuidades ocasionadas por la presencia de los nódulos que poseen un porcentaje de carbono de 100%.

En la Figura VII-6 (b) se ve un esquema del perfil de concentración aún más simplificado que el que se muestra en la Figura VII-6 (a), en él se considera una concentración uniforme de carbono  $C_{pro}$  en todo el líquido de la zona 3. Esta simplificación se utiliza en el análisis con el fin de facilitar los cálculos. En el algoritmo desarrollado,  $C_{pro}$  se calcula varias veces en el mismo paso de tiempo y la fórmula utilizada en cada ocasión, como se verá más adelante, depende de si el cálculo se realiza después del crecimiento de la austenita o después del crecimiento de los nódulos de grafito.

Para la determinación de la velocidad de crecimiento de la punta de las dendritas principales  $dR_g/dt$ , se usa el perfil de concentraciones que muestra la Figura VII-6 (a), y para el cálculo del crecimiento de la austenita de la zona 1 se considera el perfil simplificado de la Figura VII-6 (b), cuidando siempre de mantener el balance de masa.

La obtención de  $C_{\infty g}$  para valores dados de  $\delta$ ,  $R_T$  y  $R_g$  se puede ver en detalle en el Apéndice II.

Si bien los granos de austenita y los nódulos de grafito crecen simultáneamente, en el modelo que se propone estos crecimientos se consideran desacoplados, cuando se calcula

el crecimiento de la austenita se considera constante el número y tamaño de los nódulos de grafito y viceversa.

En el crecimiento de la austenita se tienen en cuenta por un lado, el avance de las puntas de las dendritas principales ( $R_g$ ), controlado fundamentalmente por el sobreenfriamiento constitucional ( $C^{l/\gamma} - C_{\infty g}$ ) y por otro, el aumento de la fracción total de austenita a través del crecimiento que ésta produce en  $R_n$ , obtenido a través de un planteo de balance de masa.

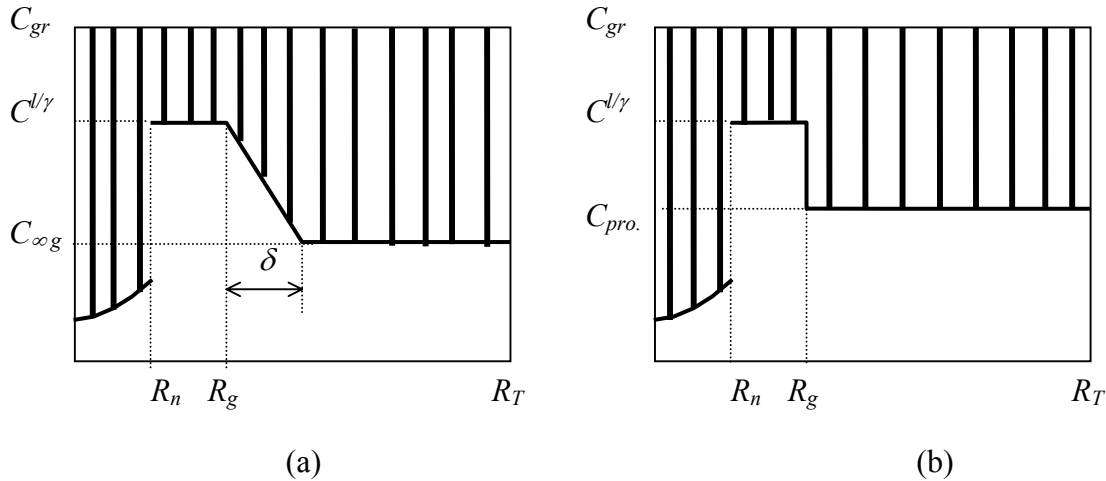


Figura VII-6: (a) perfil de concentración de carbono considerando capa límite. (b) perfil de concentración de carbono considerando concentración uniforme en zona 3.

#### a) Cinética de crecimiento de la punta de la dendrita

El crecimiento de la punta de la dendrita se considera controlado por el sobreenfriamiento constitucional y se desprecia el sobreenfriamiento térmico al suponer temperatura uniforme en todo el grano. Para la velocidad de crecimiento de la punta de la dendrita se usará la fórmula (VII-14) empleada por otros autores [54,58]

$$\frac{dR_g}{dt} = \frac{D m C_0}{\pi^2 \Gamma (k-1)} \left( \frac{C^{l/\gamma} - C_{\infty g}}{C_0} \right)^2 \quad (\text{VII-14})$$

siendo  $D$  el coeficiente de difusión del carbono en el líquido,  $m$  la pendiente de la línea de líquidus  $T_{AL}$ ,  $\Gamma$  el coeficiente de Gibbs-Thompson (coeficiente que relaciona la curvatura con el cambio de la temperatura de fusión debido a la misma  $\Delta T_{fusión} = \kappa \Gamma$ ),  $C_0$  la concentración de carbono inicial y  $k$  el coeficiente de partición que relaciona las concentraciones de sólido y líquido en equilibrio.  $C_{\infty g}$  es la concentración de carbono en el líquido intergranular fuera de la zona límite  $\delta$  y después del crecimiento del grafito (Ver Figura VII-6 (a)).

No se considera que la velocidad de crecimiento de la punta de la dendrita pueda ser negativa de manera que, si durante el cálculo resulta  $C^{l/\gamma}$  menor que  $C_{\infty g}$ , se establece que  $dR_g/dt = 0$ .

b) Crecimiento de  $R_n$  debido a la solidificación de la austenita. (ver Apéndice I)

La Figura VII-7, en la que no se representa la concentración de los nódulos de grafito para mayor simplicidad, muestra la variación del perfil de concentraciones de carbono en un paso de tiempo. Las concentraciones y radios sin comillas corresponden a un tiempo  $t$  y los que tienen comillas corresponden a un tiempo  $t+\Delta t$ .

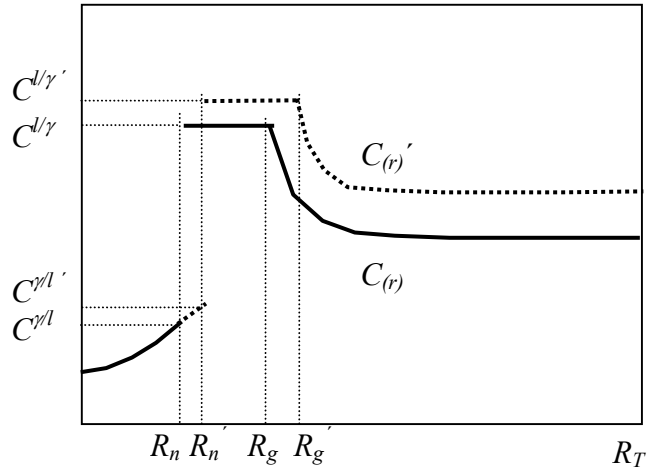


Figura VII-7: variación del perfil de concentración de carbono en un paso de tiempo.

Considerando una distribución continua (no discreta) del volumen de carbono de los nódulos de grafito en el volumen del grano, se puede calcular el volumen de carbono de los nódulos de cada zona por unidad de volumen de la misma zona tal como lo muestran las fórmulas ( VII-15)

$$\begin{aligned}
 U_{gr}^{z1} &= \frac{4}{3} \pi \sum_{j=1}^k N_{grj}^{o z1} R_{grj}^{z1 3} / V_{z1} = f_{gr}^{z1} / f^{z1} \\
 U_{gr}^{z2} &= \frac{4}{3} \pi \sum_{j=1}^k N_{grj}^{o z2} R_{grj}^3 / V_{z2} = f_{gr}^{z2} / f^{z2} \\
 U_{gr}^{z3} &= \frac{4}{3} \pi \sum_{j=1}^k N_{grj}^{o z3} R_{grj}^3 / V_{z3} = f_{gr}^{z3} / f^{z3}
 \end{aligned}
 \tag{ VII-15}$$

Suponiendo que no existe difusión del carbono a través de la superficie esférica de radio  $R_T$  correspondiente al límite de grano, la variación de la distribución del soluto durante la solidificación debe ser tal que el contenido total de carbono en el grano se mantenga constante, es decir que la suma de las variaciones del contenido de carbono en las tres zonas sea nula. Para mayor detalle de la obtención de las siguientes fórmulas ver Apéndice I.

La variación de la masa de carbono en la zona I en un paso de tiempo  $\Delta t$ , considerando constante la concentración en el sólido en  $[R_n, R_n']$  e igual a  $kC^{l/\gamma}$ , es

$$\int_{R_n}^{R_n'} k C^{l/\gamma} (1 - U_{gr}^{z2}) 4\pi \rho_\gamma r^2 dr + \int_{R_n}^{R_n'} C_{gr} U_{gr}^{z2} 4\pi \rho_{gr} r^2 dr \quad (\text{VII-16})$$

En el mismo paso de tiempo el contenido de carbono de la *zona 2* varía en

$$\begin{aligned} & \int_{R_n}^{R_g} (C^{l/\gamma'} - C^{l/\gamma}) (1 - U_{gr}^{z2}) 4\pi \rho_\gamma r^2 dr + \int_{R_g}^{R_g'} C^{l/\gamma'} (1 - U_{gr}^{z3}) 4\pi \rho_\gamma r^2 dr - \\ & - \int_{R_n}^{R_n'} C^{l/\gamma'} (1 - U_{gr}^{z2}) 4\pi \rho_\gamma r^2 dr + \int_{R_g}^{R_g'} C_{gr} U_{gr}^{z3} 4\pi \rho_{gr} r^2 dr - \\ & - \int_{R_n}^{R_n'} C_{gr} U_{gr}^{z2} 4\pi \rho_{gr} r^2 dr \end{aligned} \quad (\text{VII-17})$$

Para la *zona 3* se obtiene la siguiente variación

$$\begin{aligned} & \int_{R_g}^{R_r} \frac{\partial C}{\partial t} \Delta t (1 - U_{gr}^{z3}) 4\pi \rho_\gamma r^2 dr - \int_{R_g}^{R_g'} C'_{(r)} (1 - U_{gr}^{z3}) 4\pi \rho_\gamma r^2 dr - \\ & - \int_{R_g}^{R_g'} C_{gr} U_{gr}^{z3} 4\pi \rho_{gr} r^2 dr \end{aligned} \quad (\text{VII-18})$$

Teniendo en cuenta que, si se usa la misma ley de nucleación para las *zonas 2* y *3* y además el crecimiento de los radios de los nódulos de esas zonas se calcula como un promedio, entonces  $U_{gr}^{z2} = U_{gr}^{z3}$ , sumando las expresiones (VII-16), (VII-17) y (VII-18) e igualando a cero se obtiene la ecuación (VII-19)

$$\int_{R_n}^{R_n'} C^{l/\gamma} (k-1) 4\pi r^2 dr + \int_{R_n}^{R_g} (C^{l/\gamma'} - C^{l/\gamma}) 4\pi r^2 dr + \int_{R_g}^{R_r} \frac{dC}{dt} \Delta t 4\pi r^2 dr = 0 \quad (\text{VII-19})$$

Integrando la expresión (VII-19) y suponiendo además que  $k C^{l/\gamma}$  es constante entre  $R_n$  y  $R_n'$ , (lo que se aproximaría más a la realidad cuando más pequeño sea  $\Delta t$ ) se obtiene

$$C^{l/\gamma} (k-1) \frac{4}{3} \pi (R_n'^3 - R_n^3) + (C^{l/\gamma'} - C^{l/\gamma}) \frac{4}{3} \pi (R_g^3 - R_n^3) + D 4\pi R_g^2 \left. \frac{dC}{dr} \right|_{R_g} \Delta t = 0 \quad (\text{VII-20})$$

De la ecuación (VII-20) es posible despejar el radio  $R_n'$

$$R_n' = \sqrt[3]{\frac{3DR_g^2 \left. \frac{dC}{dr} \right|_{R_g} \Delta t + C^{l/\gamma} (1-k) R_n^3 + (C^{l/\gamma'} - C^{l/\gamma}) R_g^3}{C^{l/\gamma} (1-k) + (C^{l/\gamma'} - C^{l/\gamma})}} \quad (\text{VII-21})$$

El gradiente en  $R_g$  necesario para el cálculo de  $R_n'$  se toma como [41,48,59]

$$\left. \frac{dC}{dr} \right|_{r=R_g} = \frac{C^{l/\gamma} - C_{\infty g}}{\delta/2} \quad (\text{VII-22})$$

usándose como espesor de la capa límite  $\delta$  el que se obtiene para un frente plano [41,48,59]

$$\delta = \frac{2D}{\frac{dR_g}{dt}} \quad (\text{VII-23})$$

c) Crecimiento de  $R_n$  cuando  $\frac{dR_g}{dt} = 0$  ( $C^{l/\gamma}$  es menor que  $C_{\infty g}$ ).

Como ya se mencionó en el punto a, si durante el cálculo ocurre que  $C^{l/\gamma}$  es menor que  $C_{\infty g}$ , el algoritmo establece que  $dR_g/dt = 0$ . Si esto ocurre y además  $C^{l/\gamma} < C^{l/\gamma'}$ , para la determinación de  $R_n$  se usa la siguiente ley de crecimiento

$$R_n' = \sqrt[3]{\frac{(1-k) C^{l/\gamma} R_n^3 + \Delta C^{l/\gamma} R_g^3}{(1-k) C^{l/\gamma} + \Delta C^{l/\gamma}}} \quad (\text{VII-24})$$

Si ocurre que  $dR_g/dt = 0$  y  $C^{l/\gamma} > C^{l/\gamma'}$  entonces no hay crecimiento de  $R_n$ .

d) Crecimiento de  $R_n$  cuando  $R_g$  es igual que  $R_T$ .

Cuando  $R_g$  alcanza el valor de  $R_T$ , es decir que las puntas de las dendritas principales alcanzan el borde de grano, desaparece la zona 3 y el perfil de concentración se ve como lo muestra la Figura VII-8 en la que, para mayor simplicidad, no se tuvieron en cuenta los nódulos de grafito. Cuando esto ocurre cambia la ley de crecimiento de  $R_n$ .

En la Figura VIII-9 se muestra la variación del perfil de concentraciones de carbono en un paso de tiempo cuando no existe zona 3. Las concentraciones y radios sin comillas corresponden a un tiempo  $t$  y los que tienen comillas corresponden a un tiempo  $t + \Delta t$ .

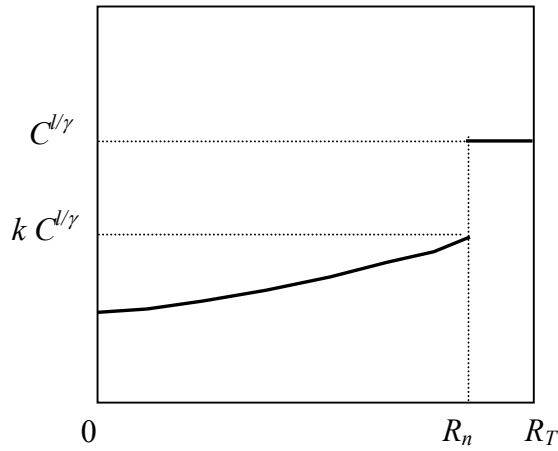


Figura VII-8: Perfil de concentración de carbono cuando  $R_g = R_T$ .

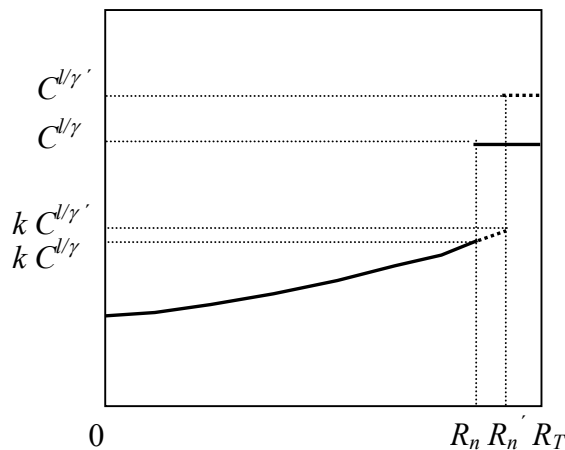


Figura VII-9: Variación del perfil de concentración en un  $\Delta t$  cuando  $R_g = R_T$ .

Como ya se mencionó, suponiendo que no hay difusión de carbono a través de la esfera de radio  $R_T$  la cantidad de soluto en el grano debe mantenerse constante.

Planteando equilibrio de masa en la Figura (VII-9) se obtiene

$$\int_{R_n}^{R_n'} C^{l/\gamma} (k-1)(1-U_{gr}^2) \rho_\gamma 4\pi r^2 dr + \int_{R_n'}^{R_T} (C^{l/\gamma'} - C^{l/\gamma})(1-U_{gr}^2) \rho_\gamma 4\pi r^2 dr = 0 \quad (\text{VII-25})$$

integrando

$$C^{l/\gamma} (k-1) \frac{4}{3} \pi (R_n'^3 - R_n^3) + (C^{l/\gamma'} - C^{l/\gamma}) \frac{4}{3} \pi (R_T^3 - R_n'^3) = 0 \quad (\text{VII-26})$$



y despejando  $R_n'$  se obtiene

$$R_n' = \sqrt[3]{\frac{C^{l/\gamma} (1-k) R_n^3 + (C^{l/\gamma'} - C^{l/\gamma}) R_T^3}{C^{l/\gamma} (1-k) + (C^{l/\gamma'} - C^{l/\gamma})}} \quad (\text{VII-27})$$

Cuando  $R_n$  alcanza el valor de  $R_T$  finaliza la solidificación.

### VII.3.8. Cálculo de $C_{pro}$ después del crecimiento de la austenita

Con el crecimiento de la fracción de austenita se produce una modificación de la concentración promedio  $C_{pro}$  de la zona 3, ver Figura VII-10.

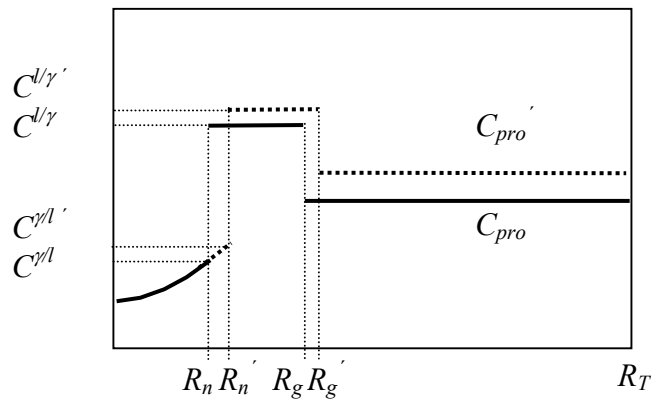


Figura VII-10: variación del perfil de concentración de carbono en un paso de tiempo.

La nueva concentración, a la que se distingue con un tilde  $C_{pro}'$ , puede ser calculada utilizando el flujo de carbono en el límite  $R_g$  y a partir del planteo de un equilibrio de masa ( ver Apéndice I), según lo muestra la expresión ( VII-28)

$$C_{pro}' = \frac{C_{pro} (R_T^3 - R_g^3) + 3D\rho_\gamma R_g^2 \left. \frac{dC}{dr} \right|_{R_g} - C^{l/\gamma'}}{(R_T^3 - R_g^3)} \quad (\text{VII-28})$$

### VII.3.9. Distribución de los nódulos ya existentes

Cuando se produce el crecimiento de la austenita varían los radios  $R_n$  y  $R_g$  por lo que algunos nódulos que antes pertenecían a la zona 2 pertenecerán después a la zona 1 y algunos nódulos que pertenecían a la zona 3 estarán después en la zona 2. Es importante resaltar que en el modelo los nódulos se suponen inmóviles y el cambio de zona se debe sólo a la modificación de los radios  $R_n$  y  $R_g$ .

a) *Distribución de los nódulos ya existentes*

Cuando se produce el crecimiento de los radios  $R_g$  y  $R_n$  (Figura VII-11), hay unos nódulos que pasan de la *zona 3* a la *zona 2* y otros que lo hacen de la *zona 2* a la *zona 1*.

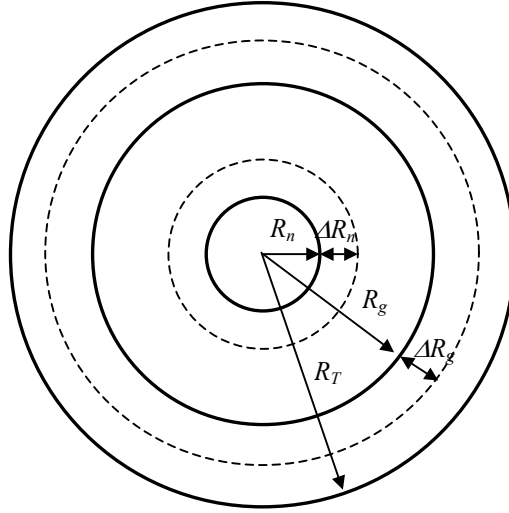


Figura VII-11: variación de los radios  $R_n$  y  $R_g$  en un paso de tiempo.

Sabiendo que

$$\sum_{j=1}^k N_{gr\ j}^{z1} \times V_T + \sum_{j=1}^k N_{gr\ j}^{z2} \times V_T + \sum_{j=1}^k N_{gr\ j}^{z3} \times V_T = \sum_{j=1}^k N_{gr\ j} \times V_T \quad (\text{VII-29})$$

Para cada grupo de nódulos  $j$ , antes y después del crecimiento de  $R_n$  y  $R_g$ , y sin tener en cuenta nuevas nucleaciones, se cumple que

$$\begin{aligned} {}^i N_{gr\ j}^{z1} \times V_T + {}^i N_{gr\ j}^{z2} \times V_T + {}^i N_{gr\ j}^{z3} \times V &= N_{gr\ j} \times V_T && \text{estado inicial} \\ {}^f N_{gr\ j}^{z1} \times V_T + {}^f N_{gr\ j}^{z2} \times V_T + {}^f N_{gr\ j}^{z3} \times V &= N_{gr\ j} \times V_T && \text{estado final} \end{aligned}$$

Restando las expresiones anteriores se obtiene

$$\Delta N_{gr\ j}^{z1} \times V_T + \Delta N_{gr\ j}^{z2} \times V_T + \Delta N_{gr\ j}^{z3} \times V_T = 0 \quad (\text{VII-30})$$

Para obtener la densidad de nódulos de las zonas  $z1$ ,  $z2$  y  $z3$ , por unidad de volumen de las zonas  $z1$ ,  $z2$  y  $z3$  respectivamente (y no del volumen total) se usan las siguientes fórmulas

$$\begin{aligned}
 \frac{N_{gr\ j}^{o\ z1}}{\frac{4}{3}\pi R_n^3} &= \frac{N_{gr\ j}^{z1}}{\frac{4}{3}\pi R_n^3} = \frac{N_{gr\ j}^{z1}}{f^{z1}} \\
 \frac{N_{gr\ j}^{o\ z3}}{\frac{4}{3}\pi(R_T^3 - R_g^3)} &= \frac{N_{gr\ j}^{z3}}{\frac{4}{3}\pi(R_T^3 - R_g^3)} = \frac{N_{gr\ j}^{z3}}{f^{z3}} \\
 \frac{N_{gr\ j}^{o\ z2}}{\frac{4}{3}\pi(R_g^3 - R_n^3)} &= \frac{N_{gr\ j}^{z2}}{\frac{4}{3}\pi(R_g^3 - R_n^3)} = \frac{N_{gr\ j}^{z2}}{f^{z2}}
 \end{aligned} \tag{VII-31}$$

Por otro lado, las variaciones de volumen debidas a los incrementos de  $R_n$  y  $R_g$  son

$$\begin{aligned}
 \Delta V_n &= \frac{4}{3}\pi \left[ (R_n + \Delta R_n)^3 - R_n^3 \right] \\
 \Delta V_g &= \frac{4}{3}\pi \left[ (R_g + \Delta R_g)^3 - R_g^3 \right]
 \end{aligned} \tag{VII-32}$$

Por lo tanto las variaciones del número de nódulos en cada zona se expresan como

$$\begin{aligned}
 \Delta N_{gr\ j}^{o\ z1} &= \frac{N_{gr\ j}^{z2}}{f^{z2}} \times \Delta V_n \\
 \Delta N_{gr\ j}^{o\ z3} &= -\frac{N_{gr\ j}^{z3}}{f^{z3}} \times \Delta V_g \\
 \Delta N_{gr\ j}^{o\ z2} &= \frac{N_{gr\ j}^{z3}}{f^{z3}} \times \Delta V_g - \frac{N_{gr\ j}^{z2}}{f^{z2}} \times \Delta V_n
 \end{aligned} \tag{VII-33}$$

Las densidades finales en cada zona de cada grupo  $j$  en el paso de tiempo considerado son

$$\begin{aligned}
 {}^f N_{gr\ j}^{z1} &= {}^i N_{gr\ j}^{z1} + \frac{\Delta N_{gr\ j}^{o\ z1}}{V_T} \\
 {}^f N_{gr\ j}^{z2} &= {}^i N_{gr\ j}^{z2} + \frac{\Delta N_{gr\ j}^{o\ z2}}{V_T} \\
 {}^f N_{gr\ j}^{z3} &= {}^i N_{gr\ j}^{z3} + \frac{\Delta N_{gr\ j}^{o\ z3}}{V_T}
 \end{aligned} \tag{VII-34}$$

*b) Distribución de los nódulos ya existentes pero en el primer paso de solidificación*

Cuando la temperatura desciende por primera vez por debajo de la temperatura eutéctica  $T_E$ , el modelo inicia la solidificación con la nucleación de la austenita, con lo que se determina el volumen que ocupará el grano, y la nucleación del grafito. En ese momento, y mientras no se produzca el crecimiento de la austenita, toda la esfera de radio  $R_T$  constituye *zona 3* y por lo tanto  $N_{gr} = N_{gr}^{z3}$ . Ver Figura VII-12.

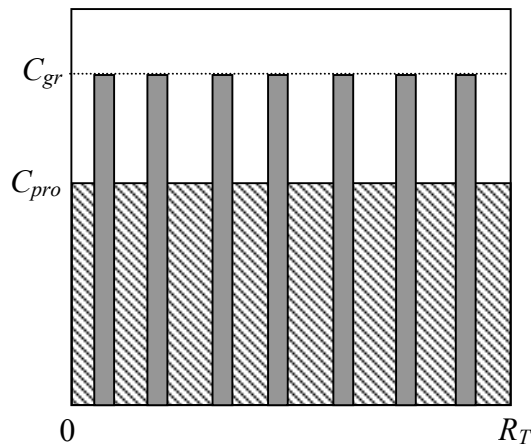


Figura VII-12: Perfil de concentración de C antes de que la austenita comience a crecer.

Al producirse el crecimiento de  $R_n$  y  $R_g$ , las fracciones  $f^{z1}$  y  $f^{z2}$  dejan de ser nulas según se puede observar en la Figura VII-13

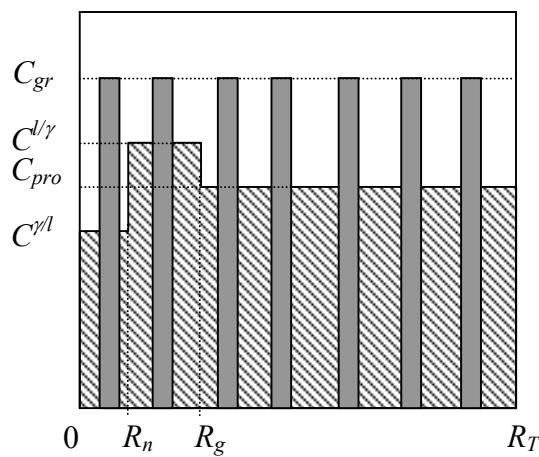


Figura VII-13: Perfil de concentración de C en el primer paso de tiempo.

Las densidades de nódulos de grafito de cada zona pueden calcularse de la siguiente forma

$$\begin{aligned}
 N_{gr}^{z1} &= \frac{i N_{gr}^{z3} V^{z1}}{V_T} = i N_{gr}^{z3} f^{z1} \\
 N_{gr}^{z2} &= \frac{i N_{gr}^{z3} V^{z2}}{V_T} = i N_{gr}^{z3} f^{z2} \\
 N_{gr}^{z3} &= \frac{i N_{gr}^{z3} V^{z3}}{V_T} = i N_{gr}^{z3} f^{z3}
 \end{aligned}
 \tag{VII-35}$$

*c) Modificación de los radios de los nódulos de grafito en la zona 1*

Cuando se produce el crecimiento del radio  $R_n$ , parte de los nódulos que se encontraban en la *zona 2*, con radios  $R_{grj}$ , pasan a la *zona 1*, en la que el radio de los nódulos del grupo  $j$  es  $R_{grj}^{z1}$ . Cuando esto ocurre se calculan nuevos radios  $R_{grj}^{z1}$  de manera que se conserve la cantidad de grafito, total y de cada grupo, de la siguiente forma

$$\begin{aligned}
 f R_{grj}^{z1} (N_{grj}^{z1} + N_{grj}^{z2} \Delta f^{z1}) &= N_{grj}^{z1} i R_{grj}^{z1} + N_{grj}^{z2} \Delta f^{z1} R_{grj} \\
 f R_{grj}^{z1} &= \sqrt[3]{\frac{N_{grj}^{z1} i R_{grj}^{z1} + N_{grj}^{z2} \Delta f^{z1} R_{grj}}{N_{grj}^{z1} + N_{grj}^{z2} \Delta f^{z1}}}
 \end{aligned}
 \tag{VII-36}$$

**VII.3.10. Crecimiento de los nódulos de grafito en el líquido**

Como ya se mencionó, el crecimiento de la austenita y el de los nódulos de grafito son simultáneos, sin embargo, para hacer posible el tratamiento numérico del proceso, dichos crecimientos se consideran secuenciales.

Los nódulos de grafito crecen tanto en el líquido interdendrítico como en el líquido intergranular, pero los crecimientos difieren debido a que las concentraciones del líquido en las zonas 2 y 3 son distintas entre sí,  $C^{l/\gamma}$  y  $C_{\infty g}$  respectivamente. A los fines del cálculo del crecimiento de los nódulos, el perfil de concentración de la *zona 3*, por simplicidad, se toma constante, de lo contrario sería necesario diferenciar el crecimiento según el lugar que cada nódulo ocupe dentro de la *zona 3*. Para los nódulos ubicados en la *zona 1* se considera velocidad de crecimiento nula.

Para los nódulos de cada grupo  $j$ , se calcula una velocidad de crecimiento que es un promedio ponderado de las velocidades de crecimiento de los nódulos de dicho grupo  $j$  en las dos zonas  $\gamma$ , y con esta velocidad, se obtiene un crecimiento promedio de los nódulos de cada grupo considerado.

En el entorno de los nódulos de grafito, el perfil de concentración de soluto presenta una forma como la de la Figura VII-14

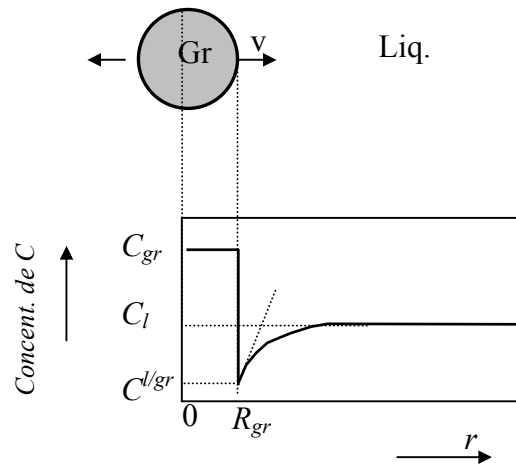


Figura VII-14: perfil de concentración de carbono durante el crecimiento de un nódulo de grafito.

Siguiendo la descripción de Kurz *et al.* [41], para el campo de difusión alrededor de una partícula esférica en estado estacionario de crecimiento, es posible obtener el gradiente de concentración en  $R_{gr}$ .

Dado que la difusión del carbono en una partícula esférica es radial y considerando además un estado estacionario, la segunda ley de Fick puede expresarse como

$$D \left( \frac{\partial^2 C}{\partial r^2} + \frac{2}{r} \frac{\partial C}{\partial r} \right) = 0 \quad (\text{VII-37})$$

y teniendo en cuenta las siguientes condiciones de borde

$$C = C_l \quad r = \infty$$

$$C = C^{l/gr} \quad r = R_{gr}$$

la solución de (VII-37) es

$$C = C_l + \frac{R_{gr}}{r} (C^{l/gr} - C_l) \quad (\text{VII-38})$$

resultando el siguiente gradiente de concentración en  $R_{gr}$

$$\left. \frac{dC}{dr} \right|_{r=R_{gr}} = \frac{C_l - C^{l/gr}}{R_{gr}} \quad (\text{VII-39})$$

El gradiente de concentración de soluto en  $R_{gr}$ , calculado con la fórmula ( VII-39), ocasiona un flujo desde el líquido hacia el nódulo que provee el carbono para su crecimiento. Se puede hallar la velocidad de crecimiento del grafito a partir del planteo de balance de masa tal como lo muestra la fórmula ( VII-40)

$$D \frac{(C_l - C^{l/gr})}{R_{gr}} \rho_l 4\pi R_{gr}^2 = 4\pi R_{gr}^2 \frac{dR_{gr}}{dt} C_{gr} \rho_{gr} - 4\pi R_{gr}^2 \frac{dR_{gr}}{dt} C^{l/gr} \rho_l \quad (\text{VII-40})$$

Despejando, la velocidad de crecimiento del grafito resulta

$$\frac{dR_{gr}}{dt} = \frac{D(C_l - C^{l/gr}) \rho_l}{R_{gr} (C_{gr} \rho_{gr} - C^{l/gr} \rho_l)} \quad (\text{VII-41})$$

Varios autores [6,74,79] utilizan, para el crecimiento controlado por difusión de los nódulos de grafito, la ecuación planteada por Zener para una partícula esférica aislada en una matriz de baja supersaturación, expresándola para el caso de los nódulos del eutéctico de fundición dúctil como

$$\frac{dR_{gr}}{dt} = \frac{D \rho_l (C^{l/\gamma} - C^{l/gr})}{2R_{gr} \rho_{gr} (C_{gr} - C^{l/gr})} \quad (\text{VII-42})$$

Las fórmulas ( VII-41) y ( VII-42) son similares y se asemejarían aún más si el gradiente expresado en la fórmula ( VII-39) tuviera la siguiente forma

$$\left. \frac{dC}{dr} \right|_{r=R_{gr}} = \frac{C^{l/\gamma} - C^{l/gr}}{2R_{gr}} \quad (\text{VII-43})$$

Esto implica que el valor de  $C_l$  sea

$$C^l = \frac{C^{l/\gamma} + C^{l/gr}}{2} \quad (\text{VII-44})$$

Esto supone que entre el grafito y la austenita, más allá de la capa límite de cada uno, el líquido posee una concentración media entre las dos concentraciones de equilibrio. Esta consideración resulta aceptable como una primera aproximación y será aplicada en el modelo en el crecimiento del grafito de la zona 2.

a) *Crecimiento del grafito en la zona 3.*

Para la zona 3 el balance de masa entre el flujo de grafito en la superficie del nódulo y el crecimiento del mismo se plantea como

$$D \frac{(C_{\infty g} - C^{l/gr})}{R_{gr}} \rho_l 4\pi R_{gr}^2 = 4\pi R_{gr}^2 \frac{dR_{gr}}{dt} C_{gr} \rho_{gr} - 4\pi R_{gr}^2 \frac{dR_{gr}}{dt} C^{l/gr} \rho_l \quad (\text{VII-45})$$

Despejando, la velocidad de crecimiento del grafito de la zona 3 resulta

$$\frac{dR_{gr}}{dt} = \frac{D(C_{\infty g} - C^{l/gr}) \rho_l}{R_{gr} (C_{gr} \rho_{gr} - C^{l/gr} \rho_l)} \quad (\text{VII-46})$$

b) *Crecimiento del grafito en la zona 2 cuando  $R_g < R_T$ .*

La velocidad de crecimiento de los nódulos de grafito ubicados en la zona 2 se obtiene siguiendo el mismo razonamiento que para la zona 3, pero con las concentraciones correspondientes.

El planteo del balance de masa resulta

$$D \frac{(C^{l/\gamma'} - C^{l/gr})}{2R_{gr}} \rho_l 4\pi R_{gr}^2 = 4\pi R_{gr}^2 \frac{dR_{gr}}{dt} (C_{gr} \rho_{gr} - C^{l/gr} \rho_l) \quad (\text{VII-47})$$

y la fórmula para la obtención de la velocidad de crecimiento es

$$\frac{dR_{gr}}{dt} = \frac{D(C^{l/\gamma'} - C^{l/gr}) \rho_l}{2R_{gr} (C_{gr} \rho_{gr} - C^{l/gr} \rho_l)} \quad (\text{VII-48})$$

c) *Crecimiento del grafito en la zona 2 cuando  $R_g = R_T$ .*

Cuando  $R_g$  alcanza el valor de  $R_T$  la zona 3 desaparece. Cesa el crecimiento de las dendritas principales y el aumento de austenita se produce por la ramificación y el ensanchamiento de las dendritas existentes. Cuando esto sucede el espacio de crecimiento de los nódulos se reduce y muchos de ellos entran en contacto con la austenita disminuyendo así su velocidad de crecimiento. Para tener en cuenta este fenómeno se afecta a la fórmula (VII-48) de un factor que depende de la fracción de austenita tal como lo muestra la siguiente expresión

$$\frac{dR_{gr}}{dt} = \frac{D(C^{l/\gamma'} - C^{l/gr}) \rho_l (1 - f_\gamma)}{2R_{gr} (C_{gr} \rho_{gr} - C^{l/gr} \rho_l)} \quad (\text{VII-49})$$

d) *Cálculo del crecimiento promedio de los nódulos de grafito de las zonas 2 y 3.*

Para simplificar el algoritmo de cálculo y reducir el requerimiento de memoria, si bien se calculan dos velocidades de crecimiento diferentes (zona 2 y zona 3), se obtiene un



crecimiento promedio de cada grupo de nódulos como si todo el carbono que se incorpora a los nódulos de un grupo en la *zona 2* y en la *zona 3* fuera repartido de manera uniforme entre ellos. Esto resulta en la fórmula ( VII-50).

$$\Delta R_{gr\ j}^{pro} = \frac{N_{gr\ j}^{z3} \Delta R_{gr\ j}^{z3} + N_{gr\ j}^{z2} \Delta R_{gr\ j}^{z2}}{(N_{gr\ j}^{z3} + N_{gr\ j}^{z2})} \quad (VII-50)$$

De esta manera se guarda sólo un radio para cada grupo *j* de nódulos de grafito. Si esto no se realizara de esta manera sería necesario considerar numerosas subdivisiones de cada grupo *j* que tuvieran en cuenta no sólo los crecimientos diferentes que se generan en las distintas zonas sino también el hecho de que parte de los nódulos de cada grupo pasa de una zona a otra a medida que se produce la modificación de  $R_g$  y  $R_n$ .

La variación promedio de los radios de cada grupo de nódulos se suma al radio promedio correspondiente anterior tal como lo muestra la fórmula ( VII-51).

$$R_{gr\ j}' = R_{gr\ j} + \Delta R_{gr\ j}^{pro} \quad (VII-51)$$

En el presente modelo se considera que el crecimiento del grafito se da sólo cuando los nódulos están en contacto con el líquido. Se supone que cuando los nódulos se encuentran dentro de la *zona 1* están totalmente rodeados por austenita y dejan de crecer.

*e) Obtención de una nueva  $C_{pro}$  después del crecimiento del grafito*

Una vez que se produjo el crecimiento de los nódulos de grafito se calcula la nueva concentración promedio de carbono en el líquido intergranular,  $C_{pro}''$ .

El cálculo se hace planteando balance de masa de soluto entre los estados anterior y posterior al crecimiento de los nódulos

$$\begin{aligned} \int_{R_g'}^{R_T} C_{pro}' [1 - U_{gr}^{z3}] 4\pi \rho_\gamma r^2 dr + \int_{R_g'}^{R_T} C_{gr} U_{gr}^{z3} 4\pi \rho_{gr} r^2 dr = \\ = \int_{R_g}^{R_T} C_{pro}'' [1 - U_{gr}^{z3}'] 4\pi \rho_\gamma r^2 dr + \int_{R_g}^{R_T} C_{gr} U_{gr}^{z3}' 4\pi \rho_{gr} r^2 dr \end{aligned} \quad (VII-52)$$

donde  $U_{gr}^{z3}'$  es el volumen de grafito de los nódulos de la *zona 3* por unidad de la *zona 3* después del crecimiento del grafito y calculado con las fórmulas ( VII-15).

Integrando y despejando  $C_{pro}''$  en ( VII-52) se obtiene la siguiente expresión

$$C_{pro}'' = \frac{C_{pro}' (1 - U_{gr}^{z3}) \rho_\gamma + C_{gr} (U_{gr}^{z3} - U_{gr}^{z3}') \rho_{gr}}{(1 - U_{gr}^{z3}') \rho_\gamma} \quad (VII-53)$$

f) Obtención de una nueva  $C^{l/\gamma}$  después del crecimiento del grafito

Planteando balance de masa de soluto entre los estados anterior y posterior al crecimiento de los nódulos en la zona 2

$$\int_{R_n}^{R_g} C^{l/\gamma'} (1 - U_{gr}^{z2}) 4\pi \rho_\gamma r^2 dr + \int_{R_n}^{R_g} C_{gr} U_{gr}^{z2} 4\pi \rho_{gr} r^2 dr =$$

$$= \int_{R_n}^{R_g} C^{l/\gamma''} (1 - U_{gr}^{z2'}) 4\pi \rho_\gamma r^2 dr + \int_{R_n}^{R_g} C_{gr} U_{gr}^{z2'} 4\pi \rho_{gr} r^2 dr \quad (\text{VII-54})$$

integrando y despejando  $C^{l/\gamma''}$  se obtiene

$$C^{l/\gamma''} = \frac{C^{l/\gamma'} (1 - U_{gr}^{z2}) \rho_\gamma + C_{gr} (U_{gr}^{z2} - U_{gr}^{z2'}) \rho_{gr}}{(1 - U_{gr}^{z2'}) \rho_\gamma} \quad (\text{VII-55})$$

### VII.3.11. Cálculo de $C_{\infty g}$ a partir de una distribución uniforme. Ver Apéndice II

El cálculo de  $C_{\infty g}$  es necesario para la determinación de la velocidad de crecimiento de la punta de las dendritas principales y para la obtención del gradiente de concentración de carbono en  $R_g$ .

Conocidos  $\delta$ ,  $C^{l/\gamma}$ ,  $C_{pro}$  y  $R_g$ , y haciendo un planteo de equilibrio de masa de soluto, es posible obtener  $C_{\infty g}$ .

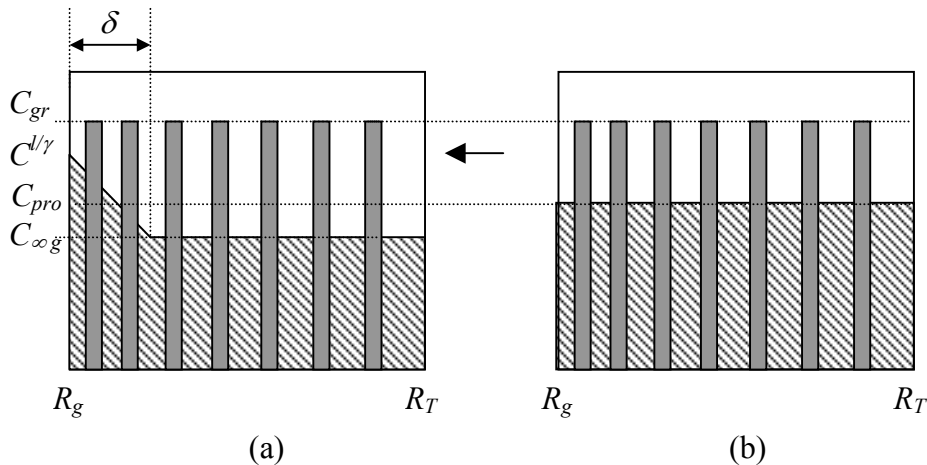


Figura VII-15: Perfil de concentración en zona 3 (a) teniendo en cuenta capa límite, (b) considerando concentración uniforme en el líquido

Teniendo en cuenta que la expresión de  $C(r)$  en función del radio, en la zona comprendida por  $R_g$  y  $R_g + \delta$  (Ver Figura VII-15 (a)) es

$$C_{(r)} = C^{l/\gamma} - \frac{(C^{l/\gamma} - C_{\infty g})(r - R_g)}{\delta} \quad (\text{VII-56})$$

planteando balance de masa de soluto

$$\begin{aligned} & \int_{R_g}^{R_g+\delta} C_{(r)} (1 - U_{gr}^{z3}) 4\pi \rho_\gamma r^2 dr + \int_{R_g+\delta}^{R_T} C_{\infty g} (1 - U_{gr}^{z3}) \rho_\gamma 4\pi r^2 dr = \\ & = \int_{R_g}^{R_T} C_{pro} (1 - U_{gr}^{z3}) 4\pi \rho_\gamma r^2 dr \end{aligned} \quad (\text{VII-57})$$

resolviendo las integrales y despejando la incógnita  $C_{\infty g}$  se obtiene la siguiente expresión

$$C_{\infty g} = \frac{C^{l/\gamma} \delta (6R_g^2 + 4R_g\delta + \delta^2) + C_{pro} (-R_T^3 + R_g^3)}{4R_g^3 + 6R_g^2\delta + 4R_g\delta^2 + \delta^3 - 4R_T^3} \quad (\text{VII-58})$$

Si ocurre que  $R_g + \delta > R_T$  la fórmula utilizada para la obtención de  $C_{\infty g}$  es

$$C_{\infty g} = \frac{C^{l/\gamma} A_1 - 4C_{pro} \delta A_2}{A_3} \quad (\text{VII-59})$$

donde

$$A_1 = (R_g^3 + 4R_g^2\delta + R_g^2R_T + 4R_gR_T\delta + R_gR_T^2 - 3R_T^3 + 4R_T^2\delta)$$

$$A_2 = (R_g^2 + R_gR_T + R_T^2)$$

$$A_3 = (R_g^3 + R_g^2R_T + R_gR_T^2 - 3R_T^3)$$

usándose en el cálculo para la determinación de la velocidad de crecimiento de  $R_g$  el siguiente valor  $C_{\infty g}^*$

$$C_{\infty g}^* = C_{\infty} + \frac{[\delta - (R_T - R_g)](C^{l/\gamma} - C_{\infty g})}{\delta} \quad (\text{VII-60})$$

#### VII.4. DIAGRAMA DE FLUJO

El modelo desarrollado para la simulación de la solidificación de la fundición nodular se implementó en una subrutina que fue incorporada a un programa de elementos finitos capaz de resolver problemas térmicos con cambios de fase [14]. La subrutina recibe el valor de la temperatura en cada punto de Gauss y provee, para la resolución de la ecuación del calor, la información sobre la evolución de la fracción sólida desde que comienza hasta que finaliza el proceso de solidificación. La estrategia de solución

numérica utiliza un “acoplamiento fuerte” [14] entre el problema macroscópico y el microscópico que consiste básicamente en las siguientes dos condiciones:

- La variación de la función de cambio de fase  $\dot{f}_{pc}$  permanece constante y conocida durante la resolución de la ecuación de la energía para una iteración determinada (pero no para todo el paso de tiempo).
- En el modelo microestructural la temperatura y su derivada temporal son conocidas y constantes para la misma iteración  $j$ .

La subrutina de solidificación ha sido implementada en el programa de tal manera que es posible guardar y luego postprocesar la evolución en el tiempo de otras variables de interés, además de la temperatura y la fracción sólida, como son los porcentajes de silicio en el líquido, las fracciones de austenita y de grafito y la velocidad de crecimiento de la punta de las dendritas principales. También es posible conocer el tamaño de grano y la distribución final de tamaño de los nódulos de grafito.

En el Figura VII-16 puede verse un diagrama de flujo simplificado que muestra los puntos principales del algoritmo implementado.

En el diagrama se observa que para el cálculo de una determinada variable no siempre se usa la misma fórmula sino que ésta depende de las ramas del diagrama que se hayan seguido. Por razones de espacio sólo se especifican las fórmulas de obtención de dichas variables.

Las principales bifurcaciones del diagrama se dan cuando solidifica por primera vez, cuando el radio  $R_g$  ya alcanzó el valor de  $R_T$  y cuando la velocidad de crecimiento de la punta de las dendritas principales es igual a cero.

En los casos en que para la realización de un cálculo se requiere el valor de una variable anterior al último calculado ésta se distingue con un subíndice 0.

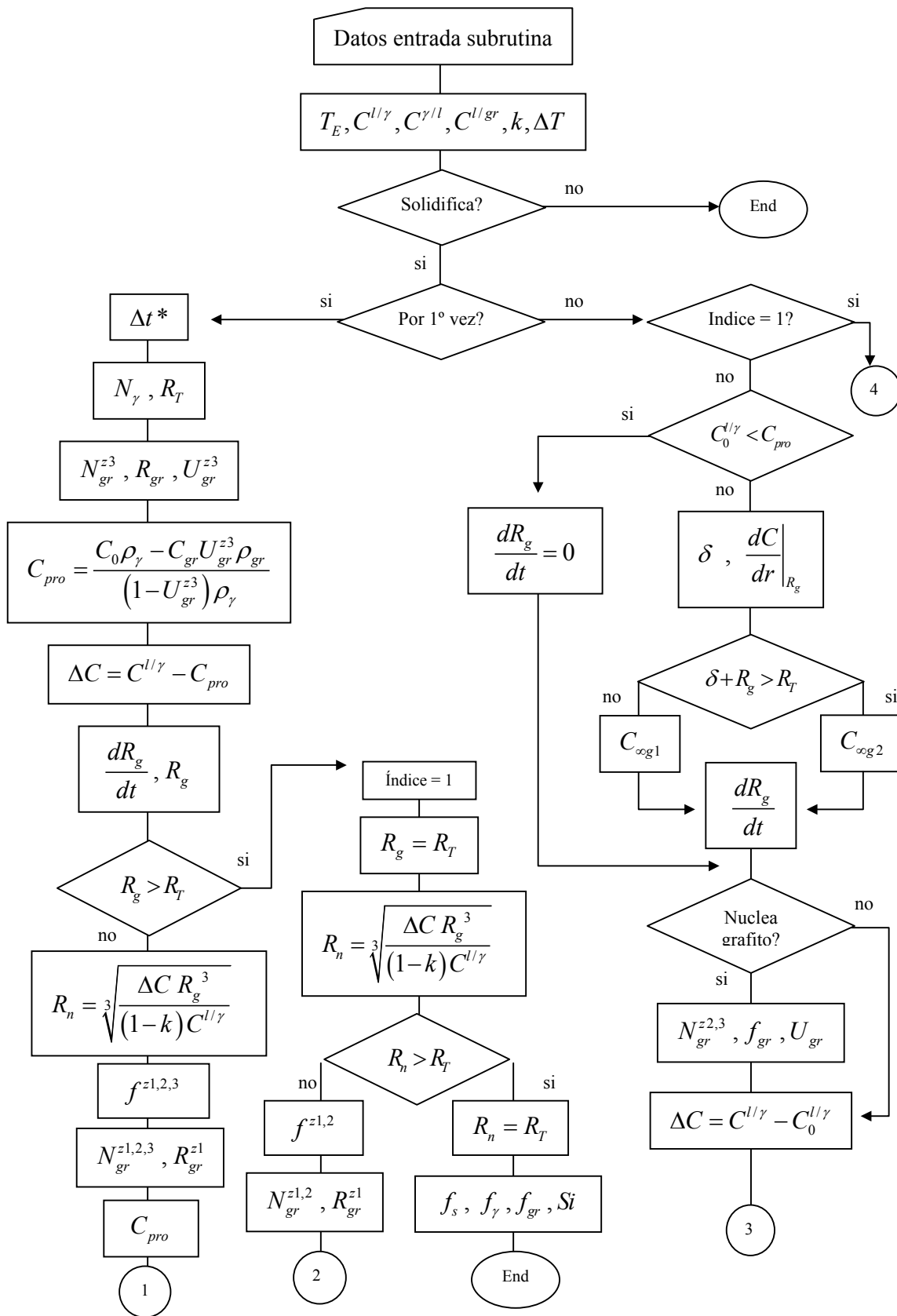
## VII.5. CONCLUSIONES

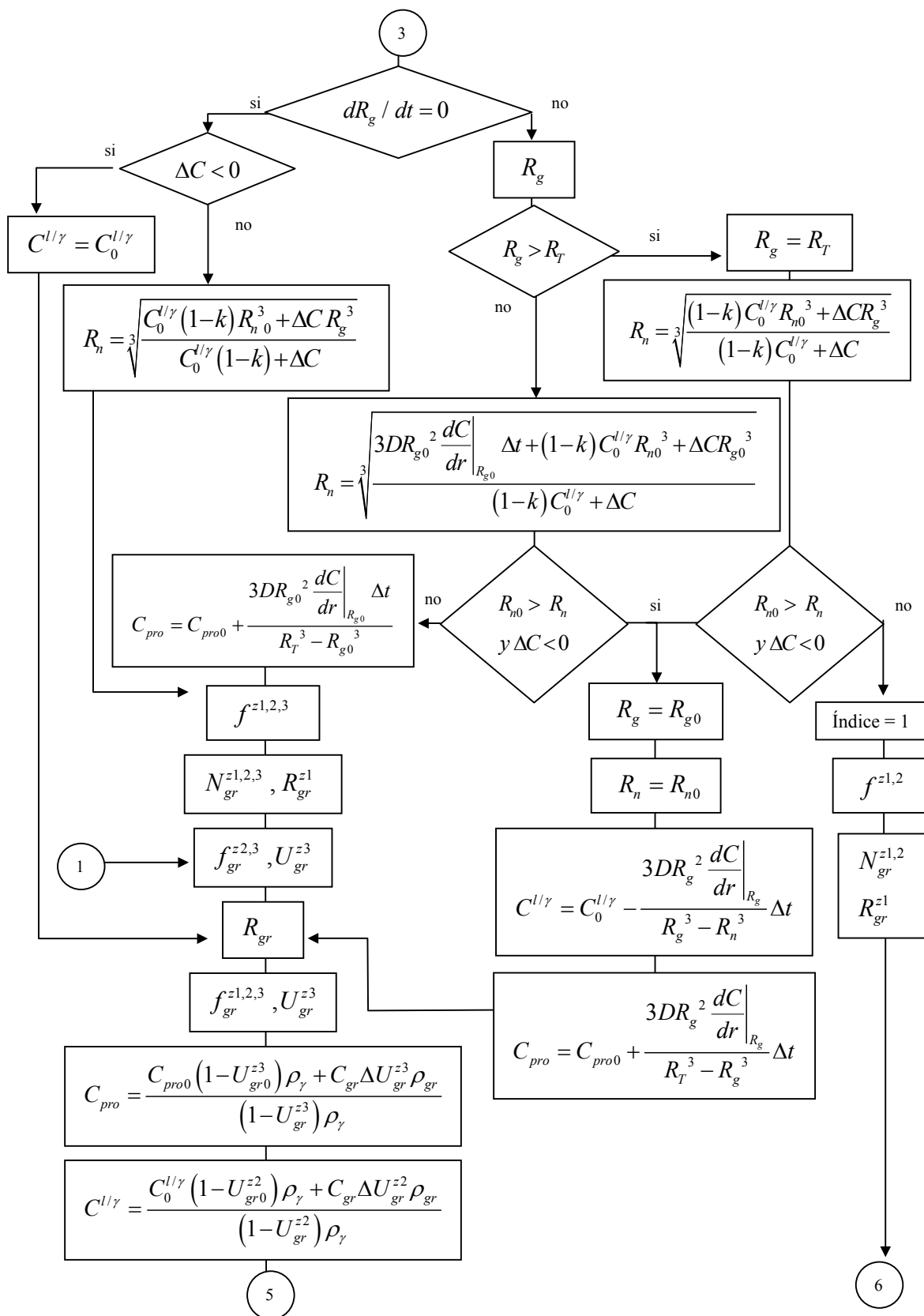
Este capítulo presentó un nuevo modelo numérico microestructural para la simulación de la solidificación equiaxial de una fundición nodular eutéctica. Dicho modelo responde a un enfoque fenomenológico y ha sido acoplado a la resolución, a nivel macromecánico, de la ecuación de conducción del calor por elementos finitos. El acoplamiento se realiza por el método del calor latente.

El nuevo modelo responde a la teoría plurinodular de solidificación y tiene en cuenta la nucleación independiente de la austenita y el grafito. El aporte fundamental reside en la combinación del crecimiento dendrítico de la austenita y esférico de los nódulos de grafito en el mismo modelo, manteniendo en todo momento el balance de masa de soluto. La nucleación y el crecimiento independientes de la austenita permiten conocer el tamaño de grano final de la misma, que no puede ser determinado en los modelos que utilizan la regla de la palanca. La importancia del tamaño final de los granos de austenita se debe a la gran influencia que el mismo ejerce sobre las características de la microsegregación y las

transformaciones de fase posteriores y por lo tanto sobre las características mecánicas finales de la pieza.

El modelo permite obtener las curvas de enfriamiento, el tamaño de grano de austenita, el tamaño de los nódulos de grafito y su distribución, la evolución en el tiempo de las fracciones de líquido, austenita y grafito, también la evolución en el tiempo del porcentaje de silicio en el líquido y de las puntas de las dendritas principales.





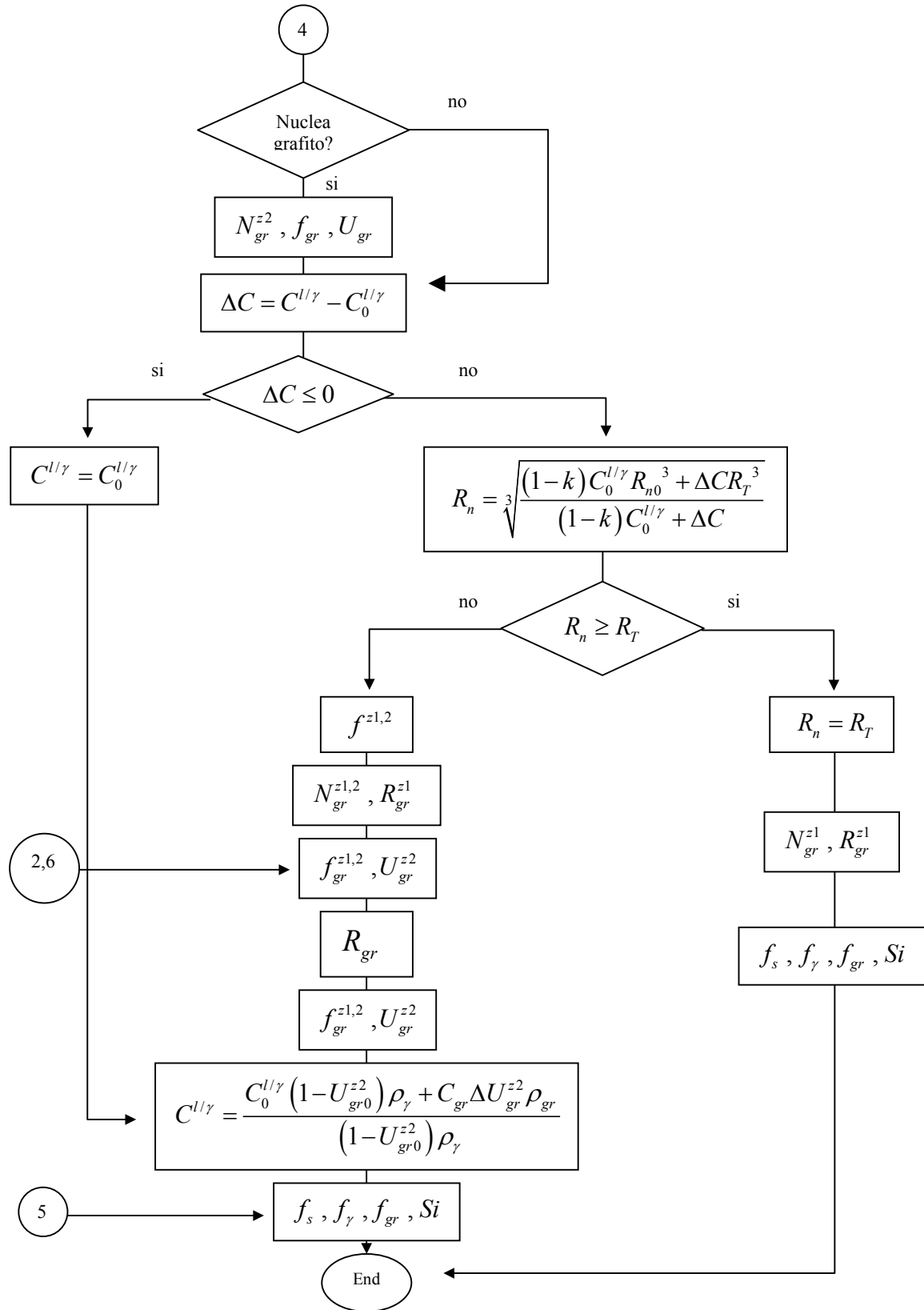


Figura VII-16: Diagrama de flujo



## GLOSARIO

$A$	Parámetro de nucleación de la austenita.
$b, c$	Parámetros de nucleación del grafito.
$C_E$	Concentración de carbono de la composición eutéctica.
$C_{TE}$	Máxima solubilidad del carbono a temperatura eutéctica.
$C_0$	Concentración de carbono inicial.
$C^{l/\gamma}$	Concentración de carbono del líquido en contacto con la austenita.
$C^{\gamma/l}$	Concentración de carbono de la austenita en contacto con el líquido.
$C^{l/gr}$	Concentración de carbono del líquido en contacto con el grafito.
$C^{\gamma/gr}$	Concentración de carbono de la austenita en contacto con el grafito.
$C_{gr}$	Concentración de carbono del grafito.
$C_{\infty g}$	Concentración de carbono en el líquido alejado de la austenita.
$C_{pro}$	Concentración promedio de carbono en el líquido intergranular.
$D$	Coefficiente de difusión del carbono en el líquido.
$DN$	Matriz que guarda el número de nódulos de cada grupo en cada zona.
$f_{gr}$	Fracción de volumen de grafito con respecto al volumen total del grano.
$f_{gr}^{z1}, f_{gr}^{z2}, f_{gr}^{z3}$	Fracción de volumen de grafito de <i>zona 1, 2 y 3</i> , respectivamente, con respecto al volumen total del grano.
$f^{z1}, f^{z2}, f^{z3}$	Fracción de volumen de <i>zona 1, 2 y 3</i> , respectivamente, con respecto al volumen total del grano.
$f_l$	Fracción de volumen de líquido con respecto al volumen total del grano.
$f_l^{z2}, f_l^{z3}$	Fracción de volumen de líquido de <i>zona 2 y 3</i> , respectivamente, con respecto al volumen total del grano.
$f_\gamma$	Fracción de volumen de austenita con respecto al volumen total del grano.
$f_s$	Fracción de volumen de sólido con respecto al volumen total del grano.
$j$	Índice que indica el grupo de nucleación de los nódulos de grafito.

$K$	Número total de grupos de nucleación de nódulos de grafito.
$k$	Coefficiente de partición del carbono.
$L$	Calor latente de solidificación.
$m$	Pendiente de la línea de líquidus.
$N_{\gamma}$	Densidad de grano de austenita.
$N_{gr}$	Número de nódulos de grafito por unidad de volumen total de grano.
$N_{gr}^{z1}, N_{gr}^{z2}, N_{gr}^{z3}$	Número de nódulos de grafito de zonas 1, 2 y 3, respectivamente, por unidad de volumen total de grano.
$N_{gr}^{o z1}, N_{gr}^{o z2}, N_{gr}^{o z3}$	Numero de nódulos de grafito de zonas 1, 2 y 3 respectivamente.
$r$	Radio.
$R_g$	Radio de la esfera que envuelve las puntas de las dendritas principales de austenita.
$R_{gr}$	Radio de nódulo de grafito en zona 2 y 3.
$R_{gr}^{z1}$	Radio de nódulo de grafito en zona 1.
$R_n$	Radio de zona 1.
$R_T$	Radio total del grano.
$RN$	Matriz que guarda el tamaño de los nódulos de cada grupo en el líquido.
$RNZI$	Matriz que guarda el tamaño de los nódulos de cada grupo en la zona 1.
$Si$	Porcentaje de silicio en el líquido.
$t$	Tiempo.
$T$	Temperatura.
$T_{AL}$	Temperatura de líquidus de la austenita.
$T_{AS}$	Temperatura de sólidos de la austenita.
$T_E$	Temperatura eutéctica.
$T_{GL}$	Temperatura de líquidus del grafito.
$U_{gr}^{z1}, U_{gr}^{z2}, U_{gr}^{z3}$	Volumen de grafito de las zonas 1, 2 y 3 por unidad de volumen de zona 1, 2 y 3 respectivamente.
$V_T$	Volumen total de grano.
$z1, z2, z3$	Zonas en las que se divide el grano que solidifica.

$\delta$	Espesor capa límite.
$\Delta T$	Sobreenfriamiento.
$\Delta t$	Paso de tiempo.
$\Delta t^*$	Paso de tiempo modificado.
$\Gamma$	Coefficiente de Gibbs-Thomson.
$\rho_l, \rho_\gamma, \rho_{gr}$	Peso específico del líquido, la austenita y el grafito respectivamente.



## CAPÍTULO VIII

# ANÁLISIS DEL COMPORTAMIENTO MICROMECHANICO DEL MODELO

### VIII.1. INTRODUCCIÓN

En el presente capítulo se realiza un análisis de sensibilidad a la variación de ciertos parámetros del modelo explicado en el Capítulo VII. Se muestra la influencia de la variación de los parámetros de nucleación de la austenita  $A$  (Sección VIII.3. ) y del grafito  $b$  y  $c$  (Secciones VIII.4. y VIII.5. ). En la Sección VIII.6. se analiza el efecto que produce el cambio de la velocidad de enfriamiento. La influencia de la modificación del paso de tiempo utilizado en el cálculo se ve en la Sección VIII.7. Las conclusiones se expresan en la Sección VIII.8.

Los parámetros  $A$ ,  $b$  y  $c$  permiten ajustar el modelo a las condiciones del caso en estudio que influyen en la nucleación, tales como inoculación, composición y tratamiento del líquido.

La velocidad de enfriamiento, factor de gran influencia en las características de la microestructura final, depende principalmente de la temperatura inicial, el tamaño de la pieza, las propiedades térmicas del molde y del contacto pieza-molde y de las condiciones del ambiente. Evidentemente hay una interrelación entre la evolución de la temperatura y la evolución de la fracción sólida. Por un lado la temperatura determina las concentraciones de equilibrio, presentes en casi todas las ecuaciones utilizadas en la simulación micromecánica de la solidificación, y por otro, la evolución de la fracción sólida causa la generación del calor latente que interviene en la ecuación del calor, con cuya resolución se obtiene la temperatura.

El paso de tiempo  $\Delta t$  elegido para el cálculo también puede influir sobre los resultados, dicha influencia es numérica.

### VIII.2. CASO BASE

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 VIII-1). En el problema no se simulan molde ni 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. Las dimensiones del elemento son lo suficientemente reducidas 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 VIII.1, y sobre él se modifican uno a uno los parámetros cuya influencia se analiza. Para este caso base la temperatura inicial es de 1200 °C y el calor extraído  $q = 30 \text{ J/m}^2 \text{ s}$ .

Conductividad [W/m°C]:	sólido = 29, pastoso = 25, líquido = 80	
Densidad [kg/m <sup>3</sup> ]:	7000	
Calor específico [kJ/kg °C]:	$c_p = 0.61 + 1.214 \times 10^{-4} \times T$	para $777 \text{ °C} < T \leq 1130 \text{ °C}$
	$c_p = 0.915$	para $T > 1130 \text{ °C}$
Calor latente [kJ/kg]:	250	
Coef. de difusión del carbono [m <sup>2</sup> /s]:	en el líquido = $5.0 \times 10^{-10}$	en la austenita = $9.0 \times 10^{-11}$
Constantes de nucleación grafito:	$b = 9.0 \times 10^{16}$	$c = 950$
Constante de nucleación austenita:	$A = 5.0 \times 10^{08}$	

Tabla VIII.1: propiedades básicas utilizadas en el análisis de sensibilidad.

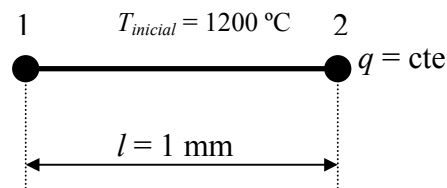


Figura VIII-1: Elemento unidimensional para el análisis de sensibilidad.

La Figura VIII-2 muestra la curva de enfriamiento que se obtiene en el cálculo.

En la Figura VIII-3 puede verse la superposición de la evolución con el tiempo de la temperatura y de las fracciones de líquido, austenita y grafito. La línea 1 permite observar cómo, cuando la fracción líquida comienza a descender marcadamente dicho descenso es producido principalmente por la solidificación de austenita, ya que el grafito nuclea y crece todavía muy lentamente. El brusco incremento en la velocidad de solidificación de la austenita coincide a su vez con la máxima velocidad alcanzada por la punta de las dendritas principales (Figura VIII-5). En ese momento la curva de enfriamiento presenta una pequeña recalescencia que desaparece cuando la velocidad de la dendrita disminuye. La línea 2 (Figura VIII-3) muestra un nuevo cambio en las pendientes de las curvas, dicho cambio es producido por la nucleación del grafito que comienza a ser más enérgica debido a que se alcanzó el sobreenfriamiento crítico. La línea 3 marca el fin de la recalescencia y muestra también un pequeño cambio en las tendencias de las curvas de austenita y fracción líquida. La línea 4 señala un cambio de pendiente en la curva de enfriamiento que también se manifiesta, aunque de manera menos perceptible, en las curvas de las fracciones de austenita y líquido. Dicho cambio de pendiente se debe a que el grafito nuclea nuevamente al bajar la temperatura por debajo de la temperatura mas baja alcanzada hasta ese momento.

En la Figura VIII-4 se ve la evolución de la temperatura superpuesta a las curvas de las concentraciones  $C_{pro}$  y  $C^{d/\gamma}$ . La línea 1 marca el comienzo de la solidificación ( $t = 7,6$  s), y la línea 2 el momento en que  $R_g$  alcanza el valor de  $R_T$  y por lo tanto ya deja de calcularse  $C_{pro}$ . Cuando la diferencia entre las dos concentraciones alcanza su mayor valor (entre las líneas 1 y 2), lo que implica la mayor velocidad de crecimiento de la punta de las dendritas principales ( $R_g$ ), en la curva de enfriamiento se produce la primera recalcencia.

La línea 3 marca el comienzo de la segunda recalcencia (relacionada con el marcado incremento del grafito, Figura VIII-2), por lo tanto, en la curva de  $C^{d/\gamma}$  es posible apreciar el inicio de una pendiente decreciente ya que su valor es inversamente proporcional al de la temperatura. Cuando  $C^{d/\gamma}$  llega a su punto más bajo comienza a influir en el crecimiento de la austenita y, por lo tanto, en la velocidad de solidificación que sufre una pequeña disminución y que permite que continúe el enfriamiento poniendo fin a la recalcencia. Las curvas de la Figura VIII-4 se grafican sólo hasta el final de la solidificación en  $t = 85$  s.

En la Figura VIII-5 que muestra la curva de velocidad de crecimiento de  $R_g$  superpuesta a las curvas de concentración  $C^{d/\gamma}$  y  $C_{pro}$ , se aprecia que la máxima velocidad de crecimiento se produce cuando mayor es la diferencia entre dichas concentraciones.

En la Figura VIII-6 se superponen las curvas de enfriamiento y de crecimiento de los radios  $R_T$ ,  $R_g$  y  $R_n$ . Se puede ver cómo se corresponden los cambios de pendientes de las distintas curvas.

### VIII.3. INFLUENCIA DEL PARÁMETRO DE NUCLEACIÓN $A$

La nucleación de la austenita en el modelo propuesto responde a la siguiente expresión

$$N_\gamma = A \frac{dT}{dt} \quad (\text{VIII-1})$$

En esta sección se analiza la influencia que el parámetro  $A$  tiene sobre los resultados, para ello el caso base se analiza variando el valor de dicho parámetro.

Como puede verse en la Figura VIII-7 y la Figura VIII-8, las curvas de enfriamiento obtenidas con los distintos valores de  $A$  no presentan diferencias apreciables. Sólo es posible observar un pequeño retardo en la primera recalcencia a medida que  $A$  disminuye.

En la Figura VIII-9 y la Figura VIII-10 se puede observar que las curvas de las fracciones de líquido, austenita y grafito para cada valor de  $A$  no difieren salvo en el comienzo de la solidificación en el que puede apreciarse un muy pequeño retardo en el cambio de pendiente de la curva que corresponde a valores más pequeños del parámetro. Esta mayor lentitud en el cambio de fase en el comienzo de la solidificación es la causa del retraso en la primera recalcencia que se observa en la Figura VIII-8.

La Figura VIII-11 muestra la evolución en el tiempo de los radios  $R_T$ ,  $R_g$  y  $R_n$  para los tres valores del parámetro de nucleación  $A$ . Se ve claramente que a medida que  $A$  aumenta, el radio total de los granos disminuye. También es posible apreciar que existe un pequeño retraso de  $R_g$  y  $R_n$  en alcanzar el valor de  $R_T$  cuando éste es mayor.

En la Figura VIII-12 se observa la diferencia que la variación de  $A$  ocasiona en las velocidades de la punta de las dendritas principales. Como se puede ver la velocidad para el parámetro menor continúa creciendo por más tiempo y alcanza un valor máximo mayor. Como ya se vio anteriormente, la mayor velocidad coincide con la mayor diferencia entre las concentraciones  $C^{l/\gamma}$  y  $C_{pro}$ . Esta diferencia puede verse en la Figura VIII-13 en la que se muestra en forma ampliada la zona de interés.

En la Figura VIII-14 y la Figura VIII-15 se puede ver que la variación del tamaño máximo y densidad de los nódulos de grafito con el cambio del parámetro  $A$  es casi imperceptible.

#### VIII.4. INFLUENCIA DEL PARÁMETRO DE NUCLEACIÓN $b$

El parámetro  $b$  interviene en la ley de nucleación del grafito según lo muestra la siguiente fórmula

$$\frac{\partial N_{gr}}{\partial t} = b\Delta T \exp\left(-\frac{c}{\Delta T}\right)(1-f_s) \quad (\text{VIII-2})$$

La variación de la curva de enfriamiento con el valor de  $b$  puede apreciarse en la Figura VIII-16. La diferencia entre las tres curvas se presenta en la zona de la segunda recalcificación que se retarda a medida que disminuye el parámetro  $b$ .

En la Figura VIII-17 se muestra el comportamiento de las curvas de evolución de las fracciones de líquido, austenita y grafito para los tres valores de  $b$ . Puede verse que las curvas son casi coincidentes y sólo se observa una pequeña separación en el momento en que se produce el marcado cambio de pendiente en las curvas de fracción de grafito. Este cambio brusco de pendiente se retrasa un poco cuando  $b$  es menor (ver Figura VIII-18) y esto produce también un pequeño retraso en el crecimiento de la fracción de austenita y en la disminución de la fracción líquida.

No se aprecia diferencia en los valores de los radios de grano obtenidos con los distintos parámetros  $b$  según puede verse en la Figura VIII-19.

Observando la Figura VIII-20 se aprecia que la única diferencia se presenta en las concentraciones  $C^{l/\gamma}$ , a partir de la segunda recalcificación, cuando se produce la separación de las curvas de enfriamiento (ver Figura VIII-16).

Cuando el parámetro  $b$  aumenta, el radio máximo de los nódulos de grafito disminuye (Figura VIII-21) y su densidad aumenta (Figura VIII-22).



### VIII.5. INFLUENCIA DEL PARÁMETRO DE NUCLEACIÓN $c$

El parámetro  $c$  interviene en la ley de nucleación del grafito que se define en la fórmula (VII-8).

Las curvas de enfriamiento para distintos valores de  $c$  de la Figura VIII-23 muestran que a valores mayores de  $c$  la recalcancia se retrasa. Esto se debe a que un leve retardo del cambio de pendiente en la fracción del grafito origina una disminución del crecimiento de la fracción austenita. Ver Figura VIII-24.

En la Figura VIII-25 se ve que la variación de  $c$  no produce modificaciones en las curvas de crecimiento de los radios  $R_T$  y  $R_g$ . Sólo se separan las curvas correspondientes a  $R_n$ , y lo hacen durante el tiempo en que también se diferencian las curvas de enfriamiento y de crecimiento de la austenita. Se observa que el aumento de  $R_n$  se retrasa cuando aumenta  $c$ .

Observando la Figura VIII-26 se aprecia que la única diferencia se presenta en las concentraciones  $C^{d/\gamma}$ , a partir de la segunda recalcancia, cuando también se produce la separación de las curvas de enfriamiento (ver Figura VIII-23).

Cuando el parámetro  $c$  disminuye, el radio máximo de los nódulos de grafito disminuye (Figura VIII-21) y su densidad aumenta (Figura VIII-22). El efecto del parámetro  $c$  es inverso al de  $b$ .

### VIII.6. INFLUENCIA DE LA VELOCIDAD DE ENFRIAMIENTO

La velocidad de enfriamiento es el factor que mayor influencia tiene sobre los resultados de la solidificación. Con el cambio de la velocidad de extracción del calor  $q$  las curvas varían en todo su desarrollo.

Como era de esperar las pendientes de las curvas de enfriamiento son mayores para mayores valores de  $q$ , tal como puede verse en la Figura VIII-29. También se observa que las recalcancias comienzan más tarde, a temperaturas mayores y son de mayor amplitud a medida que disminuye  $q$  (ver las líneas de puntos).

La Figura VIII-30 muestra claramente que, si bien no hay variación en los porcentajes finales de grafito y de austenita, sí hay una marcada diferencia entre las curvas durante su desarrollo. Aunque en la figura no pueda apreciarse, el comienzo de la solidificación se produce a la misma temperatura ( $T_E$ ) en las tres curvas, ya que la temperatura eutéctica, que es la que determina el principio del cambio de fase, depende sólo de la composición inicial y ésta es la misma en los tres casos. Evidentemente dicha temperatura se alcanza más tarde en el caso que enfría a menor velocidad por lo que en este caso la solidificación comienza después. Como puede verse en la figura también el final del proceso se retrasa para valores menores de  $q$ . Sin embargo la diferencia en los tiempos de comienzo del cambio de fase es menor que la diferencia entre los tiempos del final del cambio de fase, esto resulta en un proceso de solidificación más largo cuando menor es el valor de  $q$ .

En la Figura VIII-31 se puede ver que a mayor velocidad de enfriamiento menor tamaño de grano ( $R_T$ ) y además que tanto  $R_g$  como  $R_n$  tardan menos tiempo en alcanzar el valor de  $R_T$ .

En la Figura VIII-32 y la Figura VIII-33 se observa que, además de las diferencias en los tiempos que se producen en las curvas correspondientes a las distintas velocidades de enfriamiento, para menores valores de  $q$  se dan valores máximos de  $C^{l/\gamma}$  y de  $C_{pro}$  mayores.

Las velocidades de crecimiento de  $R_g$  alcanzadas son mayores para mayores valores de  $q$  tal como puede verse en la Figura VIII-34

La velocidad de enfriamiento también afecta el radio máximo de los nódulos de grafito que es menor cuando mayor es  $q$ , y cuando esto ocurre mayor es la densidad. Ver Figura VIII-35 y Figura VIII-36.

### VIII.7. INFLUENCIA DEL PASO DE TIEMPO

La influencia del paso de tiempo  $\Delta t$  es de carácter numérico. En esta sección se comparan los resultados obtenidos utilizando distintos pasos de tiempo.

En la Figura VIII-37 se puede observar cómo las curvas de enfriamiento que han sido calculadas con distintos pasos de tiempo se separan en la zona que corresponde al proceso de solidificación. Las dos curvas obtenidas con pasos de tiempo  $\Delta t = 0.8$  y  $\Delta t = 1.0$  casi no presentan recalcancia y son más planas. A medida que el paso de tiempo disminuye las curvas se acercan más entre sí.

Los pasos de tiempo más grandes causan mayores errores en el cálculo de las distintas fórmulas utilizadas en el análisis microestructural y esto ocasiona las diferencias observadas en las curvas de enfriamiento. Sin embargo el paso de tiempo no puede reducirse indefinidamente ya que al hacerlo no sólo el tiempo de cálculo aumenta sino que además, dado que el modelo guarda la distribución de tamaño de nódulos, se incrementa también el requerimiento computacional. Es posible observar en las figuras que las curvas calculadas con paso  $\Delta t = 0.1$  no han podido obtenerse hasta el final.

Cuando el paso de tiempo es grande puede ocurrir que el comienzo de la solidificación ( $T < T_E$ ) se detecte con un cierto retraso con respecto a un análisis realizado con paso de tiempo más pequeño. Esto puede observarse en la Figura VIII-39 en la que se ve claramente cómo el valor inicial de  $R_T$  se produce un poco más tarde debido al paso de tiempo utilizado.

En la Figura VIII-38 se observa cómo el paso de tiempo influye en la evolución de la velocidad de crecimiento de  $R_g$  (punta de las dendritas). Teniendo en cuenta que el crecimiento en un paso se calcula con la velocidad obtenida en el paso anterior se puede comprender el porqué de la forma de la curva correspondiente al paso  $\Delta t = 1$ . Por otro lado el que dicha curva no vuelva a un valor 0 se entiende si se observa en la Figura VIII-39 cómo el radio  $R_g$  llega al valor de  $R_T$  antes y con una disminución de la velocidad de crecimiento que se produce sólo en la etapa final. Al alcanzar  $R_g$  al valor de  $R_T$  se produce un cambio de ley de crecimiento que ocasiona una solidificación más lenta y esto explica

la falta de la primera recalcancia de las curvas correspondientes a los pasos de tiempo mayores.

Como ya se vio, la segunda recalcancia coincide con el incremento marcado que se da en la velocidad de nucleación de los nódulos de grafito. Este provoca a su vez un aumento en la velocidad de crecimiento de la austenita y por lo tanto se produce una aceleración de la solidificación que es la que ocasiona el cambio de pendiente en la curva de enfriamiento. Como puede verse en la Figura VIII-37 dicho cambio de pendiente se produce antes en las curvas con mayor paso de tiempo, esto puede explicarse si se observa la Figura VIII-41 en la que se ve que el aumento pronunciado de la velocidad de nucleación del grafito se da antes en el cálculo realizado con paso  $\Delta t = 1$  que en el que se usa  $\Delta t = 0.2$ . En la Figura VIII-41 también es posible ver que la fracción final de grafito para  $\Delta t = 1$  es levemente superior.

En la Figura VIII-42 se presenta la variación con el tiempo de la velocidad de nucleación del grafito para distintos pasos de tiempo para un caso simple en el que el enfriamiento es una función lineal. En la Figura VIII-43 se grafican las integrales de las curvas anteriores y puede verse cómo en  $t = 28$  el valor de la densidad de nódulos es mayor para el cálculo realizado con un paso de tiempo más grande.

En la Figura VIII-44 se observa que al aumentar el paso del tiempo aumenta levemente el valor del radio máximo de los nódulos y en la Figura VIII-45 se ve también un pequeño aumento de la densidad.

## VIII.8. CONCLUSIONES

En este capítulo se ha realizado un análisis de la respuesta del modelo microestructural a la variación de factores tales como los parámetros de nucleación de austenita y grafito, la velocidad de enfriamiento y el paso de tiempo del cálculo. Las conclusiones obtenidas se pueden resumir en los siguientes puntos:

- A mayor valor del parámetro de nucleación de la austenita  $A$  se obtienen granos más pequeños y con mayor densidad. La curva de enfriamiento varía muy poco, sólo se produce un pequeño adelanto en la primera recalcancia. No hay diferencias apreciables en los porcentajes finales de grafito y austenita.
- A mayor valor del parámetro de nucleación del grafito  $b$ , aumenta el número de nódulos y disminuye su radio máximo. No se ven afectados ni la densidad ni el tamaño de los granos de austenita. Las curvas de enfriamiento presentan un retraso de la segunda recalcancia a medida que disminuye  $b$ . No hay diferencias apreciables en los porcentajes finales de austenita y grafito. El efecto del parámetro  $c$  es inverso al de  $b$ .
- La velocidad de enfriamiento tiene gran influencia en los resultados. A medida que ésta aumenta disminuye el tiempo de solidificación y aumenta el sobreenfriamiento, aumenta el número de granos y disminuye su tamaño y también es mayor la densidad de nódulos de grafito que alcanzan radios máximos menores. Las diferencias en las fracciones finales no son apreciables.

- Un aumento inadecuado del paso de tiempo de cálculo produce un deterioro de los resultados, sin embargo no es posible utilizar pasos muy pequeños ya que esto incrementa la capacidad de máquina requerida.

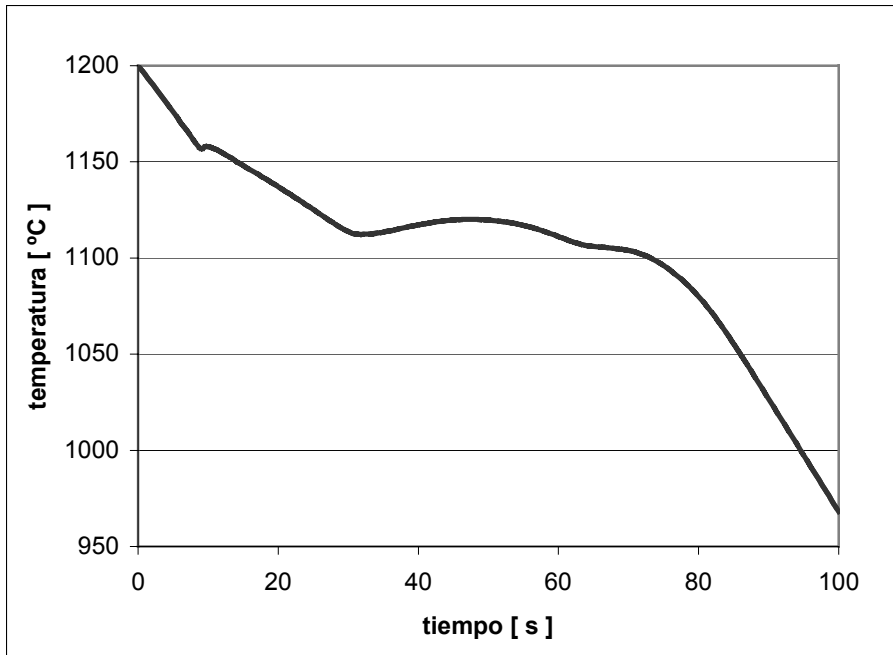


Figura VIII-2: Curva de enfriamiento.

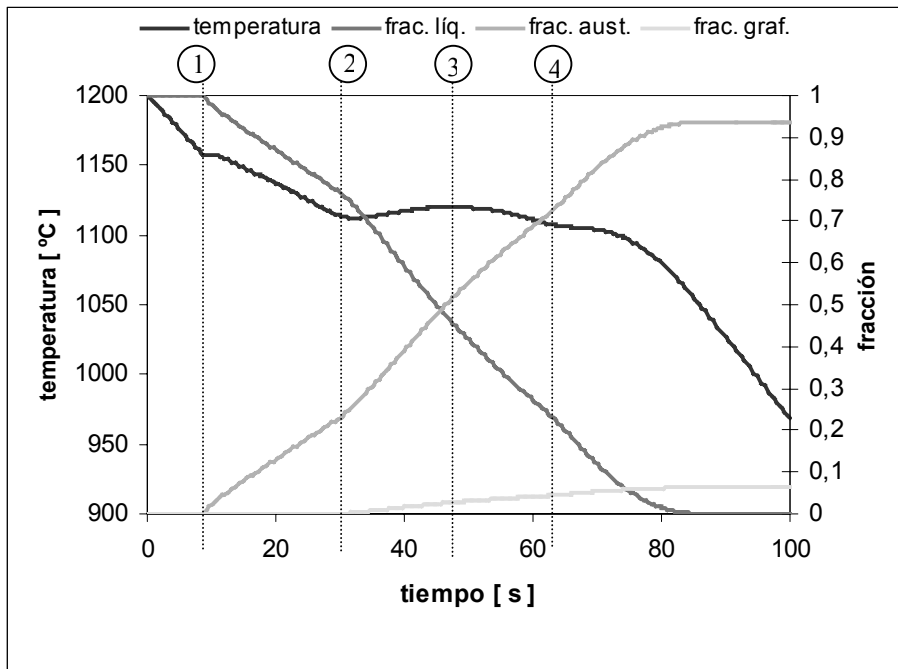


Figura VIII-3: Curvas de enfriamiento y de evolución de las fracciones de líquido, austenita y grafito.

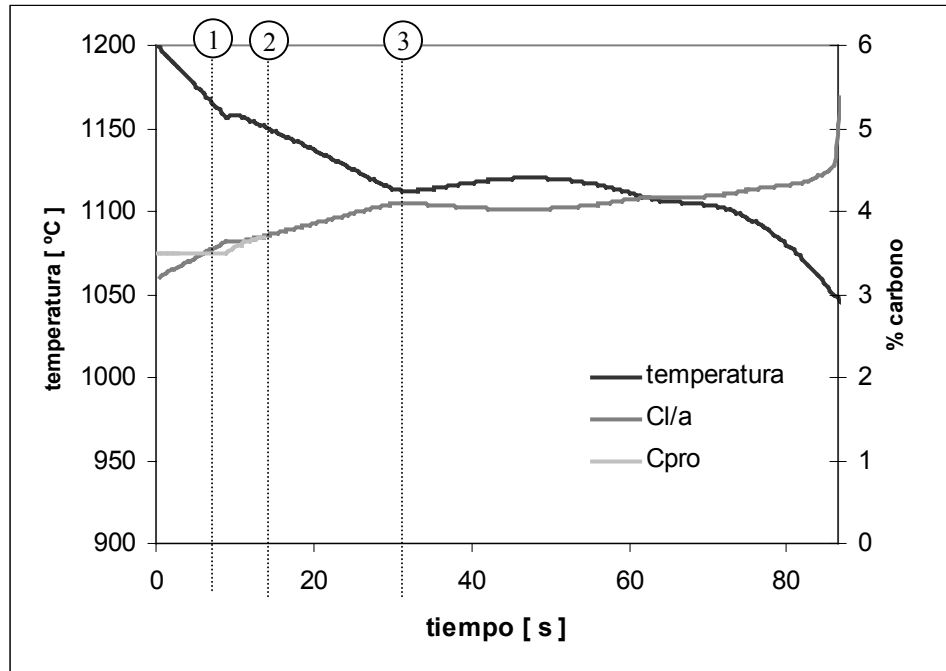


Figura VIII-4: Curva de enfriamiento y evolución de  $C_{pro}$  y  $C_{l/\gamma}$ .

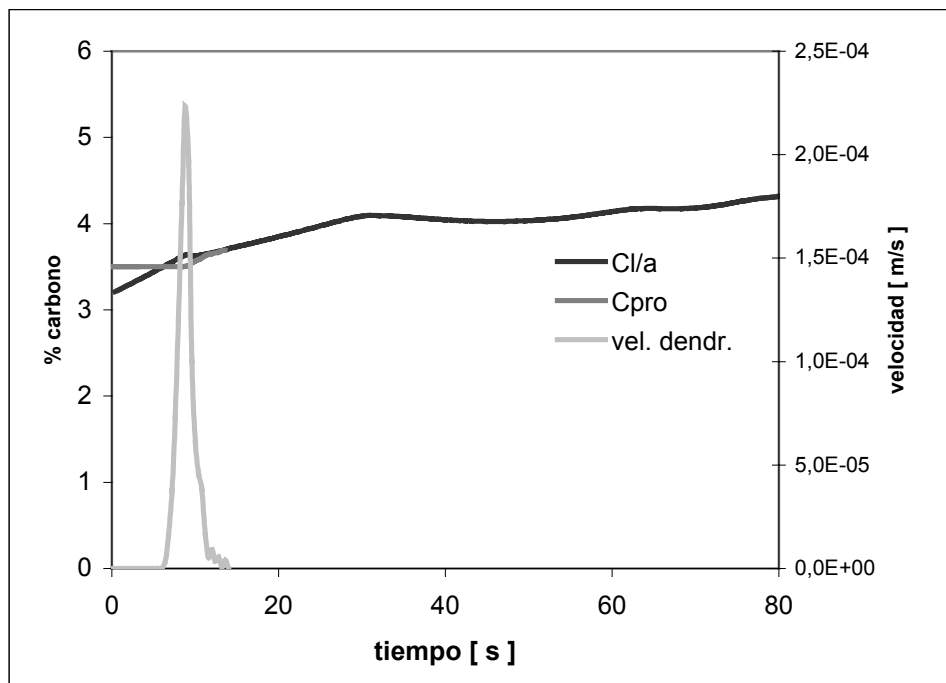


Figura VIII-5: Velocidad de la punta de las dendritas principales y evolución de  $C_{pro}$  y  $C_{l/\gamma}$ .

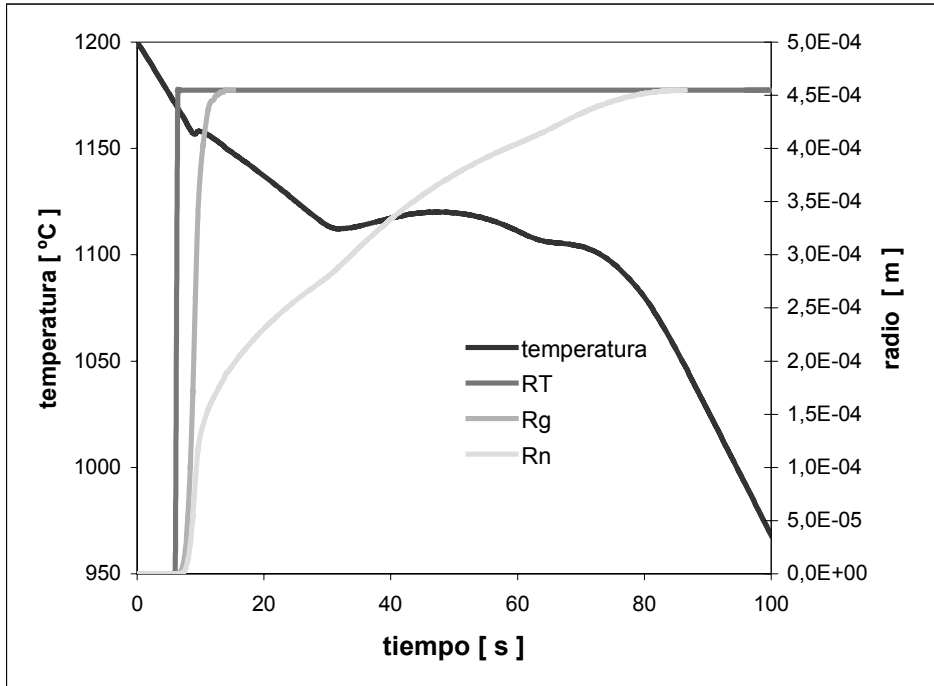


Figura VIII-6: Curvas de enfriamiento y crecimiento de radios.

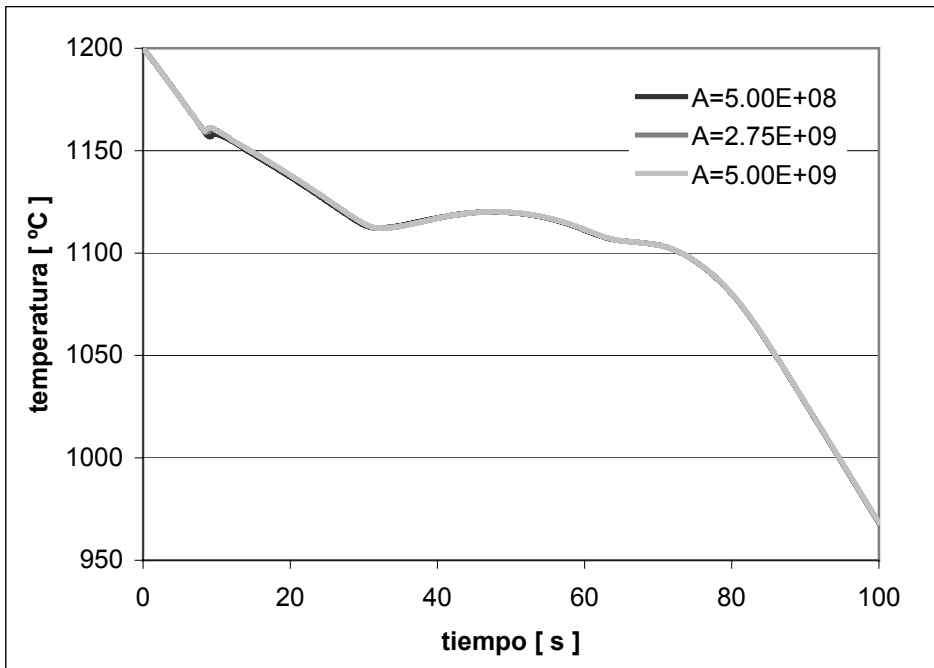


Figura VIII-7: Curvas de enfriamiento para distintos valores de  $A$ .

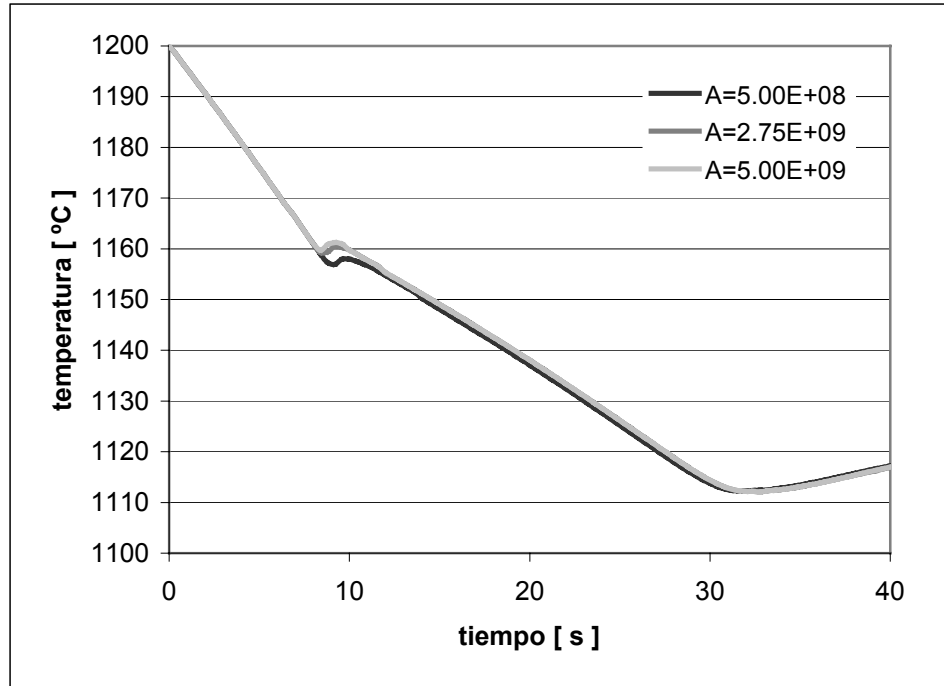


Figura VIII-8: Curvas de enfriamiento para distintos valores de  $A$  (Primera recalcencia).

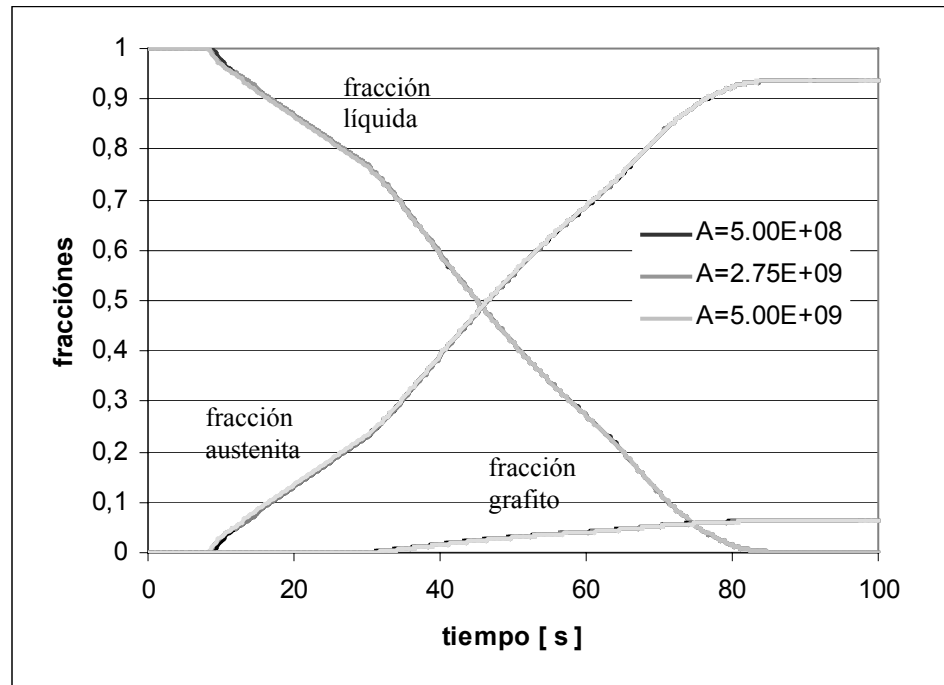


Figura VIII-9: Evolución en el tiempo de las fracciones de líquido, austenita y grafito.

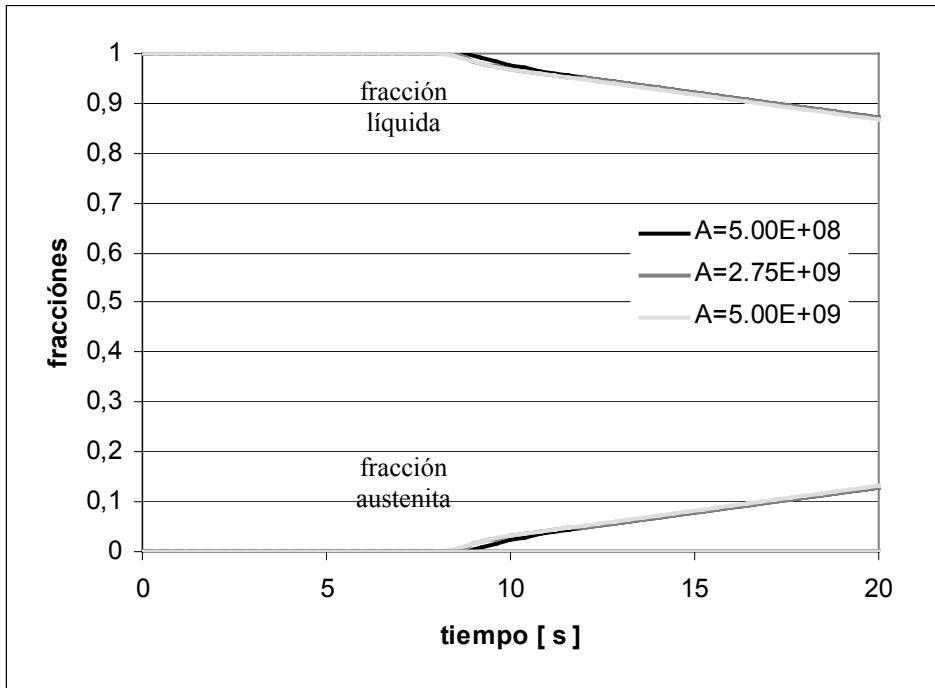


Figura VIII-10: Evolución en el tiempo de las fracciones de líquido y austenita.

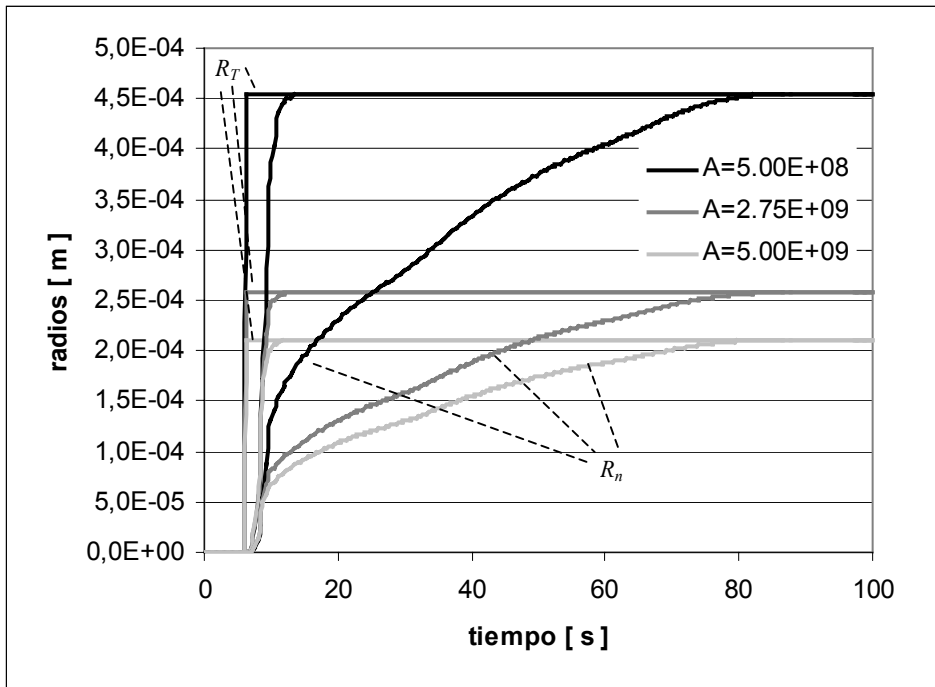


Figura VIII-11: Evolución de los radios  $R_T$ ,  $R_g$  y  $R_n$ .



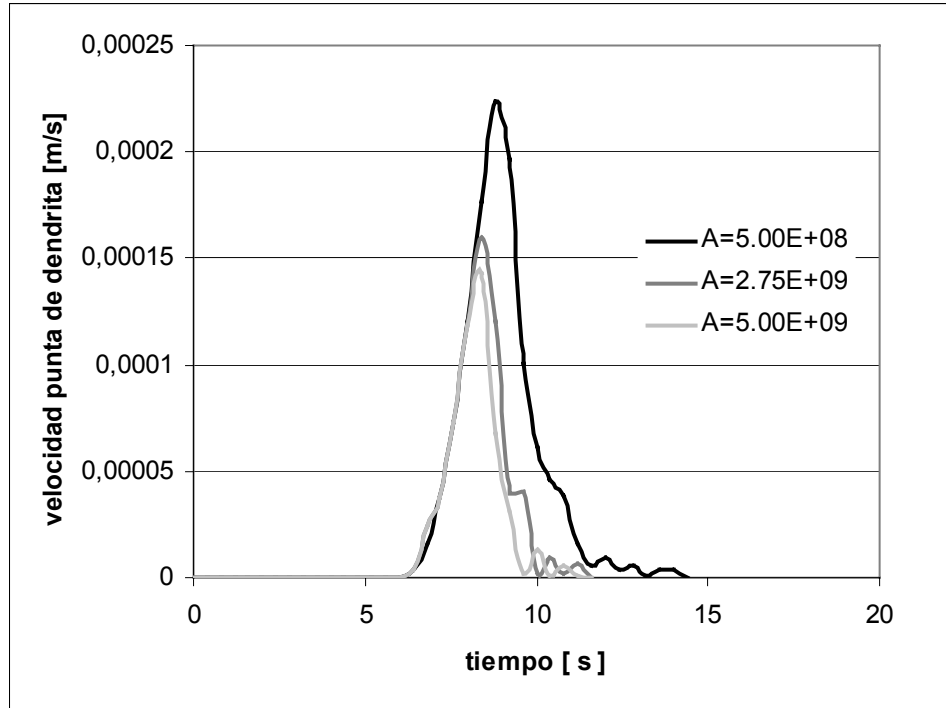


Figura VIII-12: Velocidad de la punta de las dendritas principales en función del tiempo.

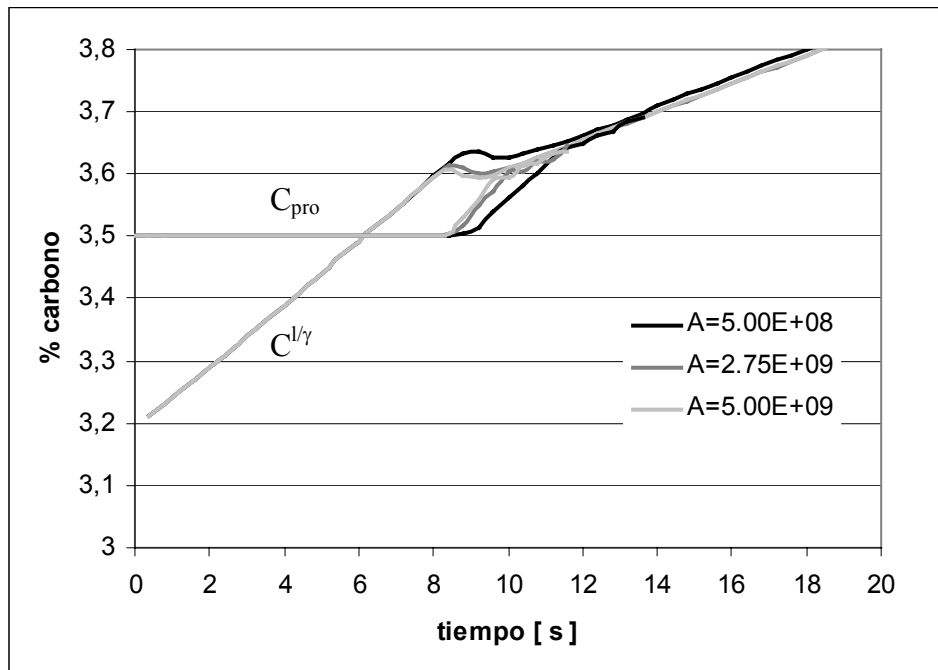


Figura VIII-13: Evolución de las concentraciones  $C^{l/\gamma}$  y  $C_{pro}$ .

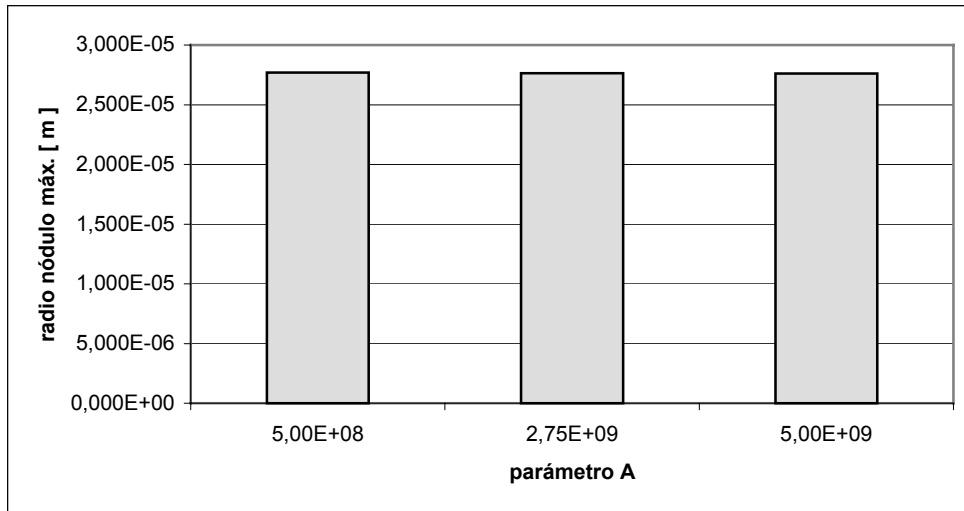


Figura VIII-14: Radio máximo de los nódulos de grafito.

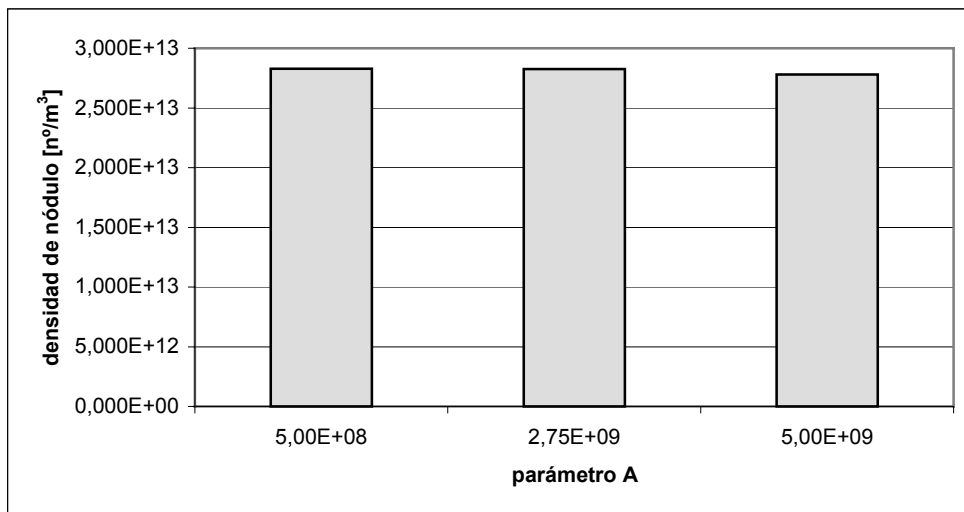


Figura VIII-15: Número de nódulos de grafito por metro cúbico de volumen.

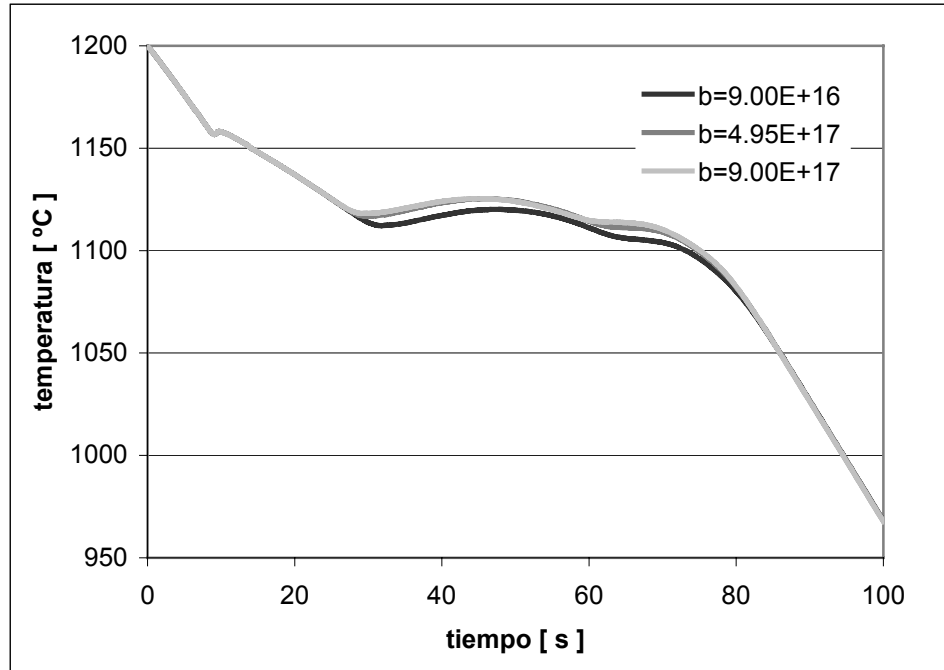


Figura VIII-16: Curvas de enfriamiento para distintos valores de  $b$ .

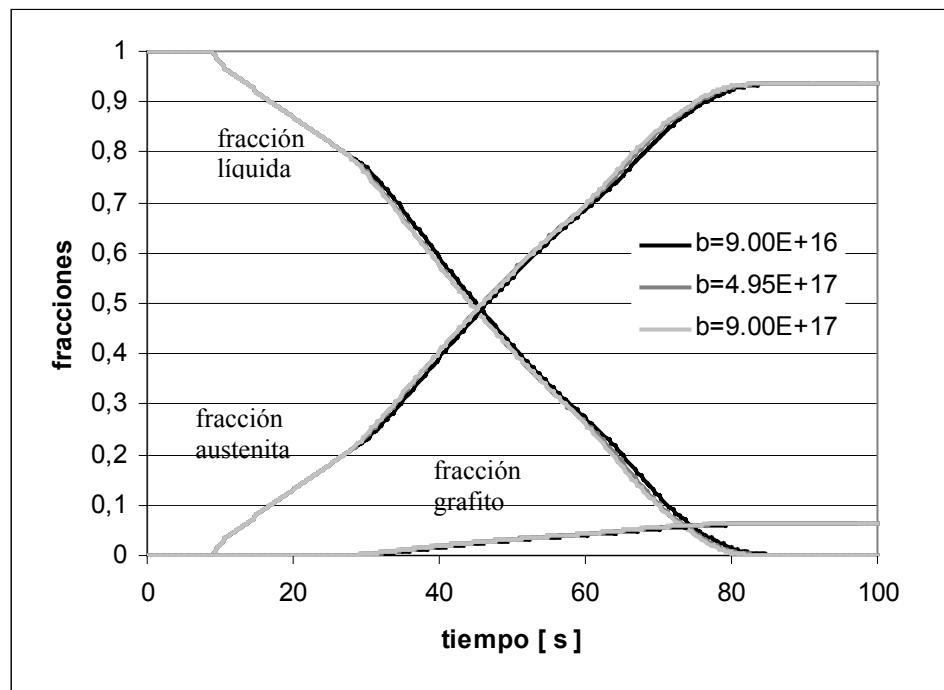


Figura VIII-17: Evolución en el tiempo de las fracciones de líquido, austenita y grafito.

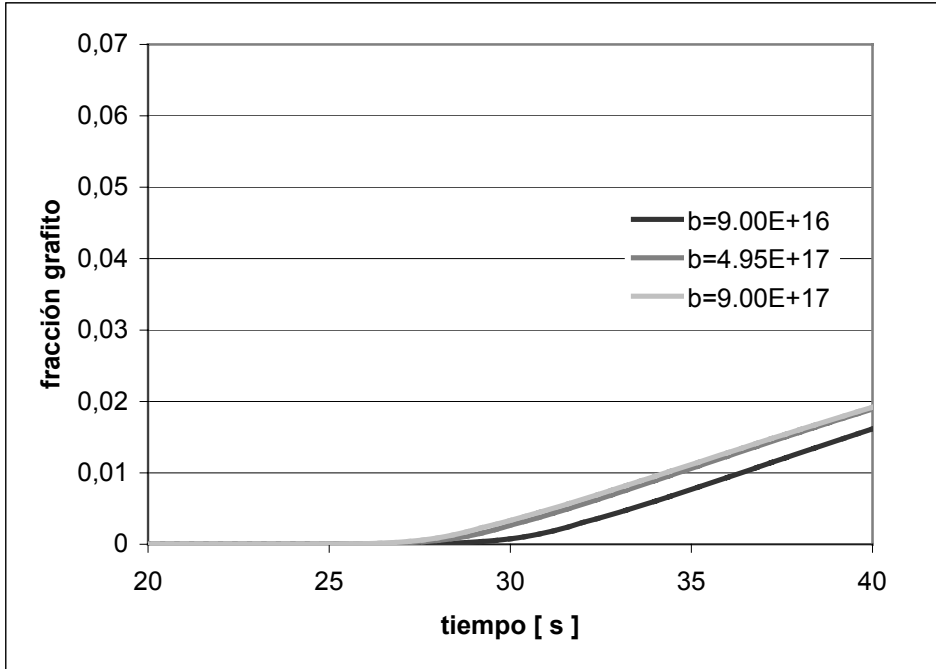


Figura VIII-18: Evolución en el tiempo de la fracción de grafito.

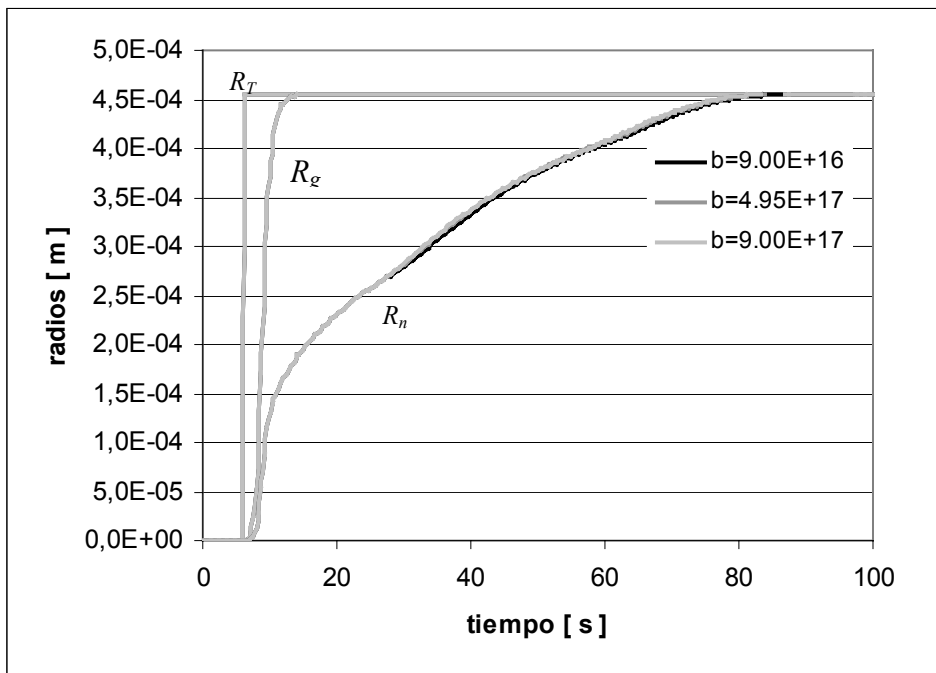


Figura VIII-19: Evolución de los radios  $R_T$ ,  $R_g$  y  $R_n$ .

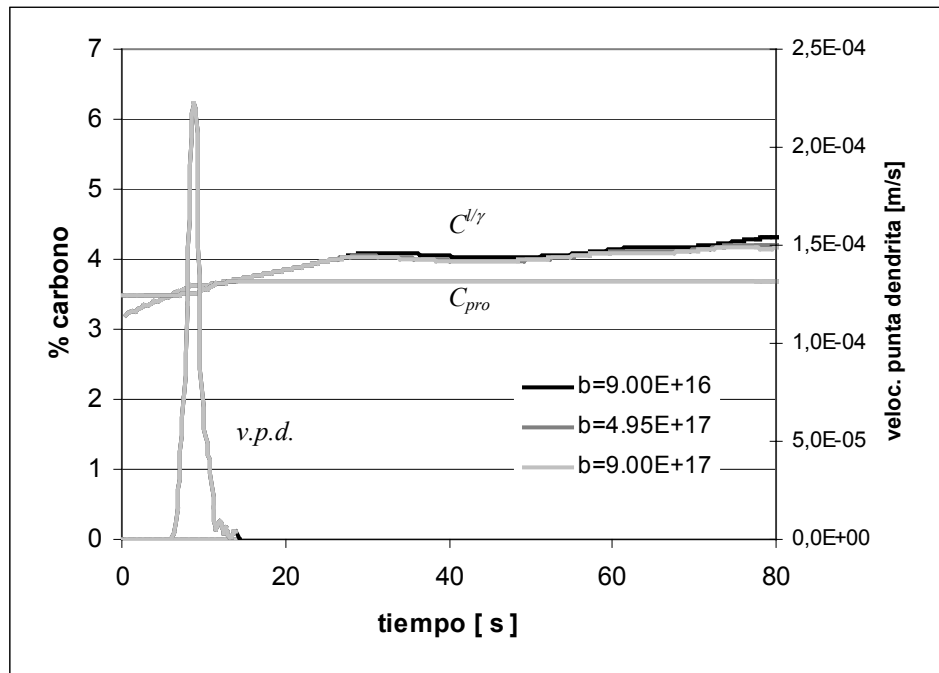


Figura VIII-20: Evolución de las concentraciones de carbono y la velocidad de la punta de las dendritas principales.

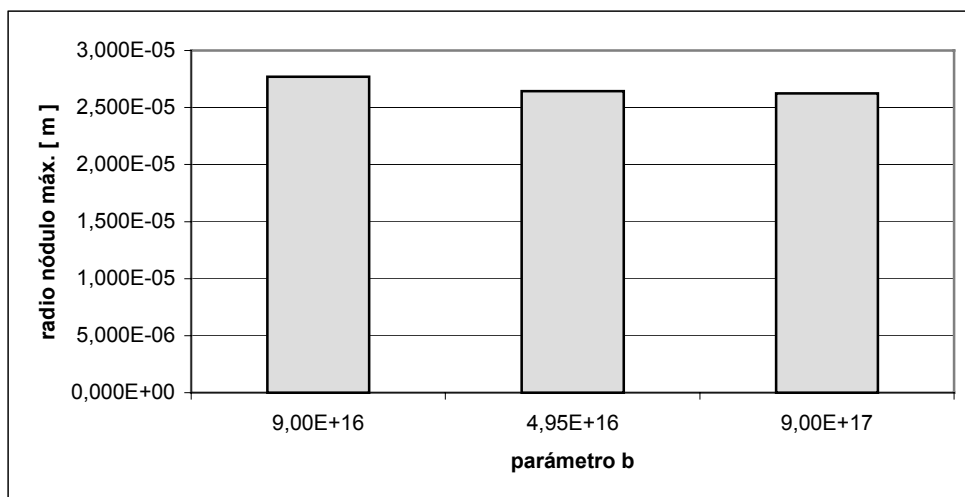


Figura VIII-21: Radio máximo de los nódulos de grafito.

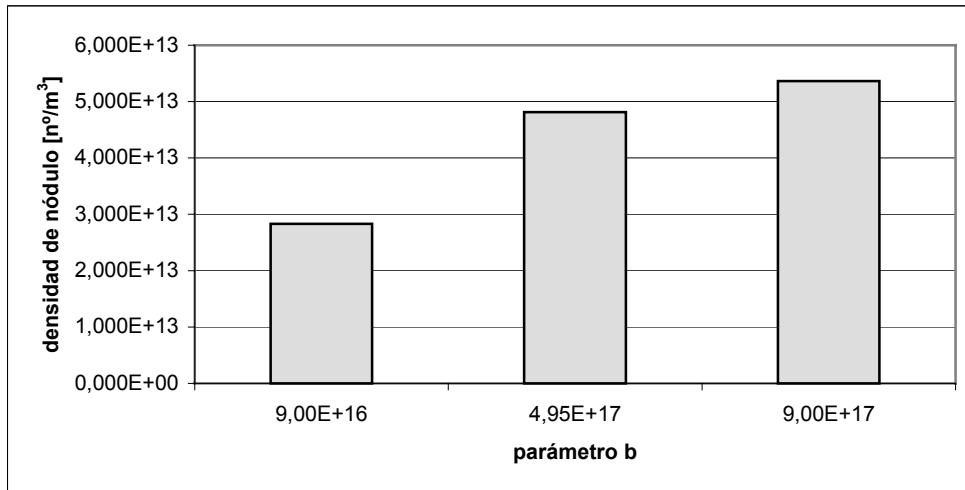
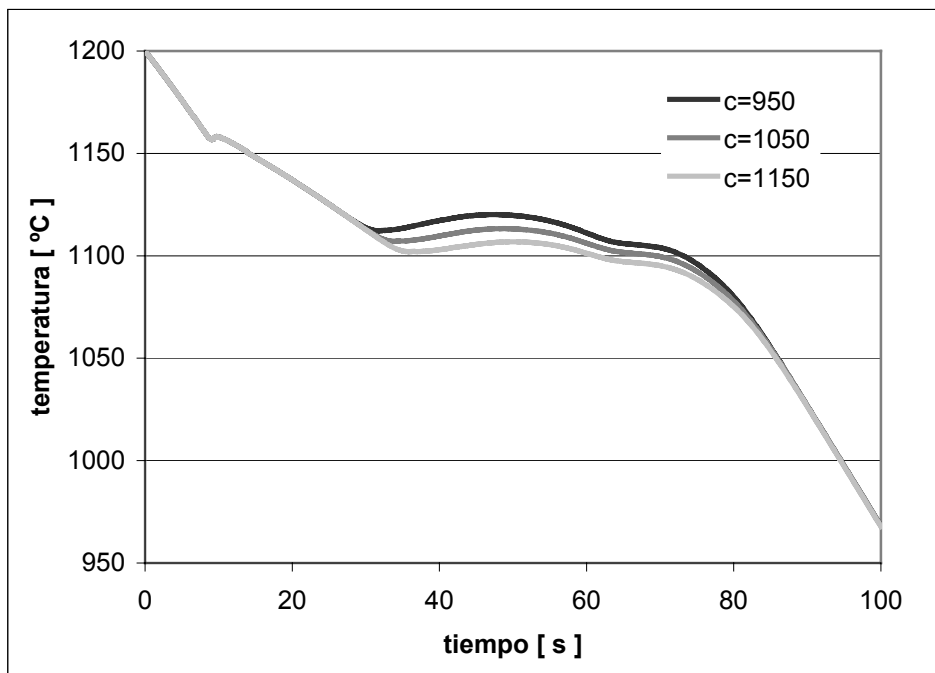


Figura VIII-22: Número de nódulos de grafito por metro cúbico de volumen.

Figura VIII-23: Curvas de enfriamiento para distintos valores de  $c$ .

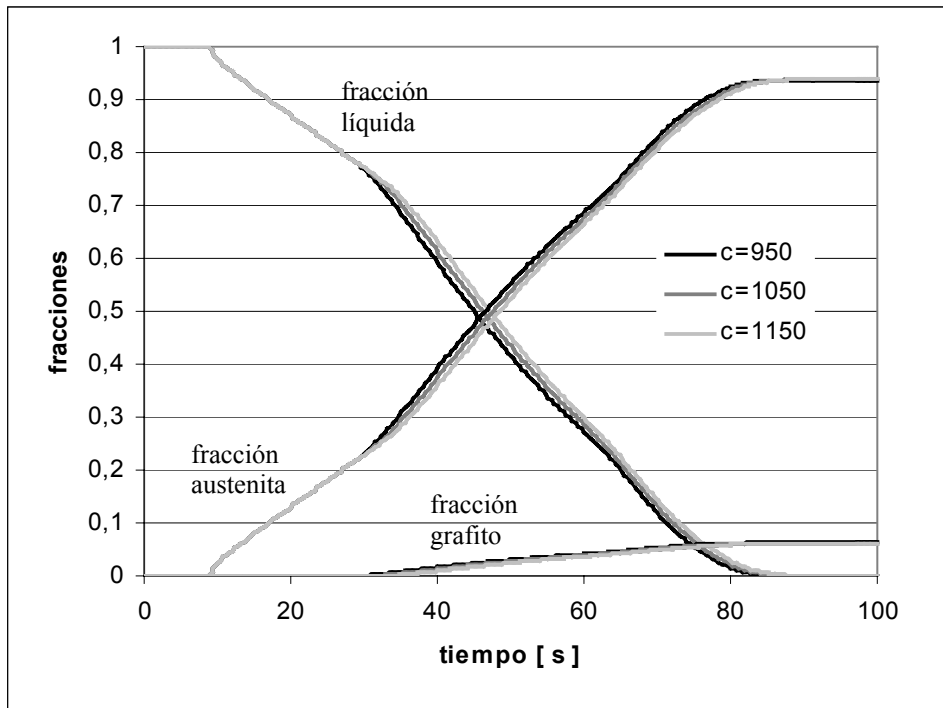


Figura VIII-24: Evolución en el tiempo de las fracciones de líquido, austenita y grafito.

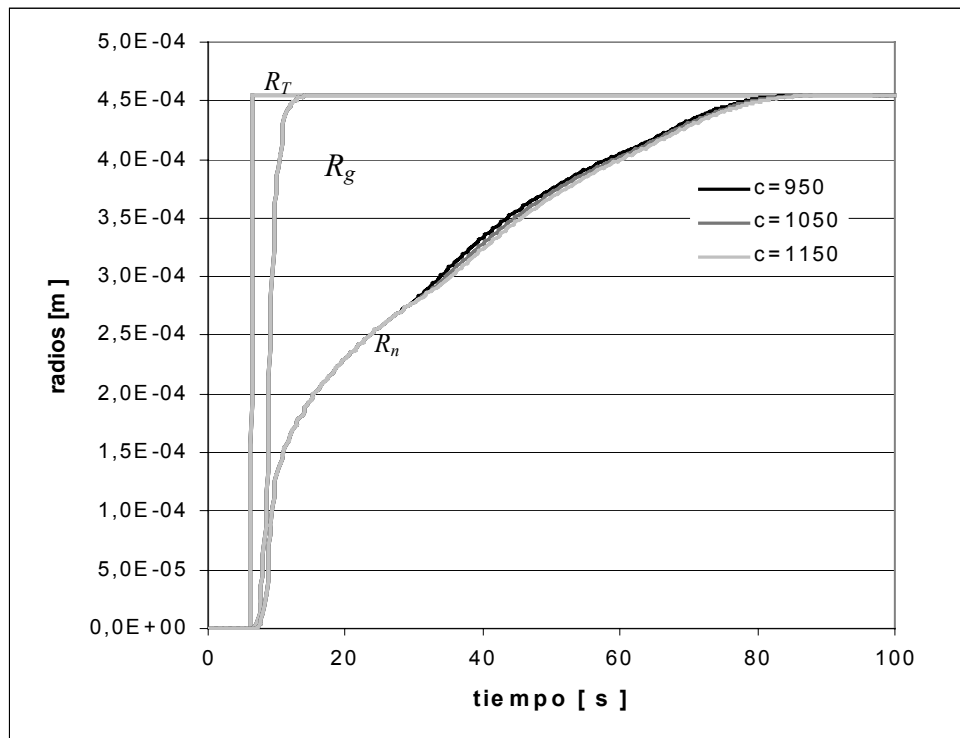


Figura VIII-25: Evolución de los radios  $R_T$ ,  $R_g$  y  $R_n$ .

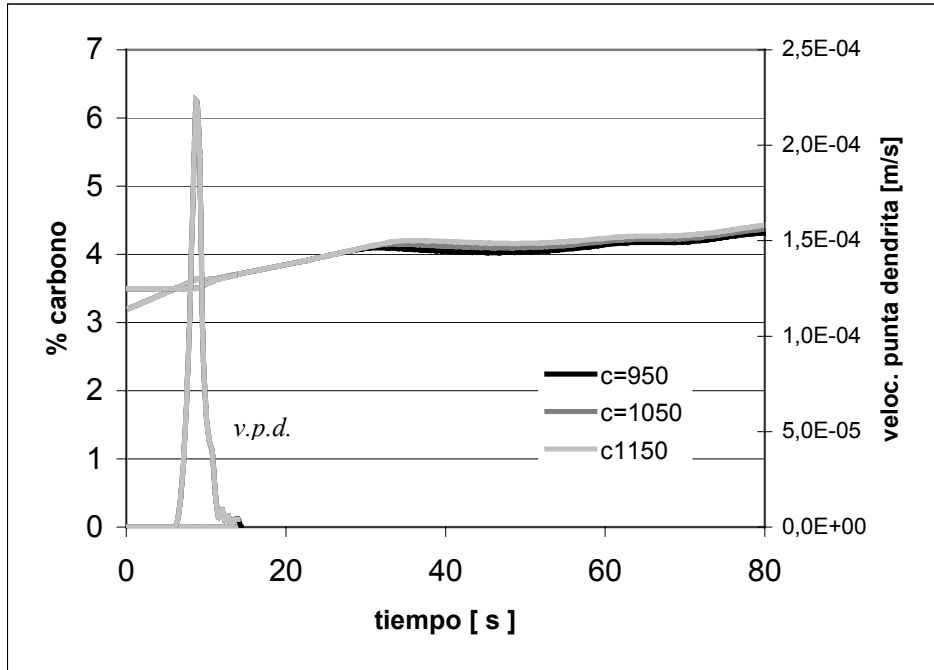


Figura VIII-26: Evolución de las concentraciones de carbono y la velocidad de la punta de las dendritas principales.

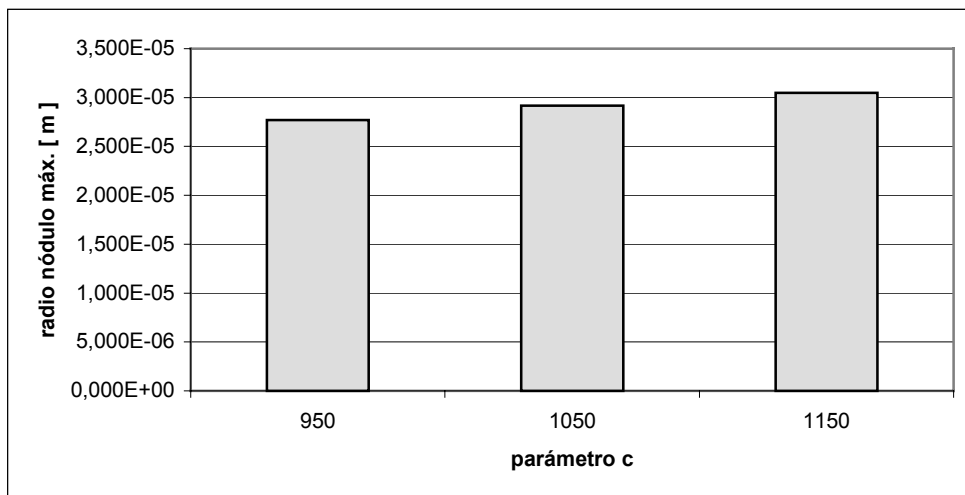


Figura VIII-27: Radio máximo de los nódulos de grafito.



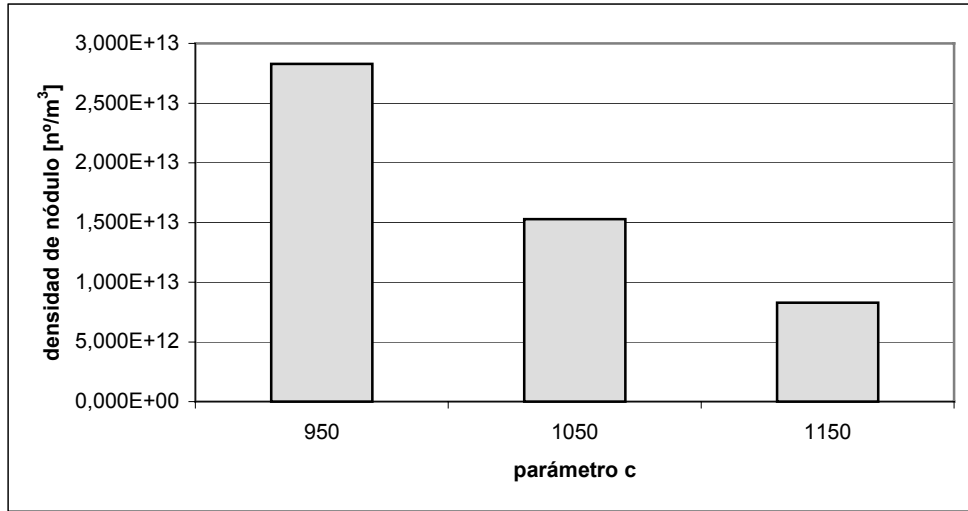


Figura VIII-28: Número de nódulos de grafito por metro cúbico de volumen.

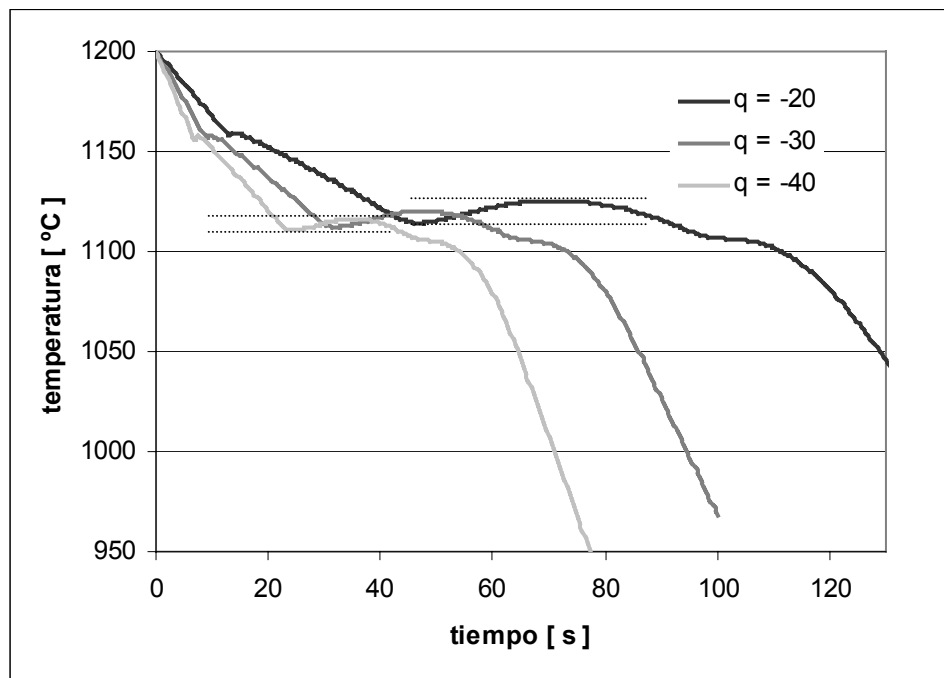


Figura VIII-29: Curvas de enfriamiento para distintos valores de  $q$ .

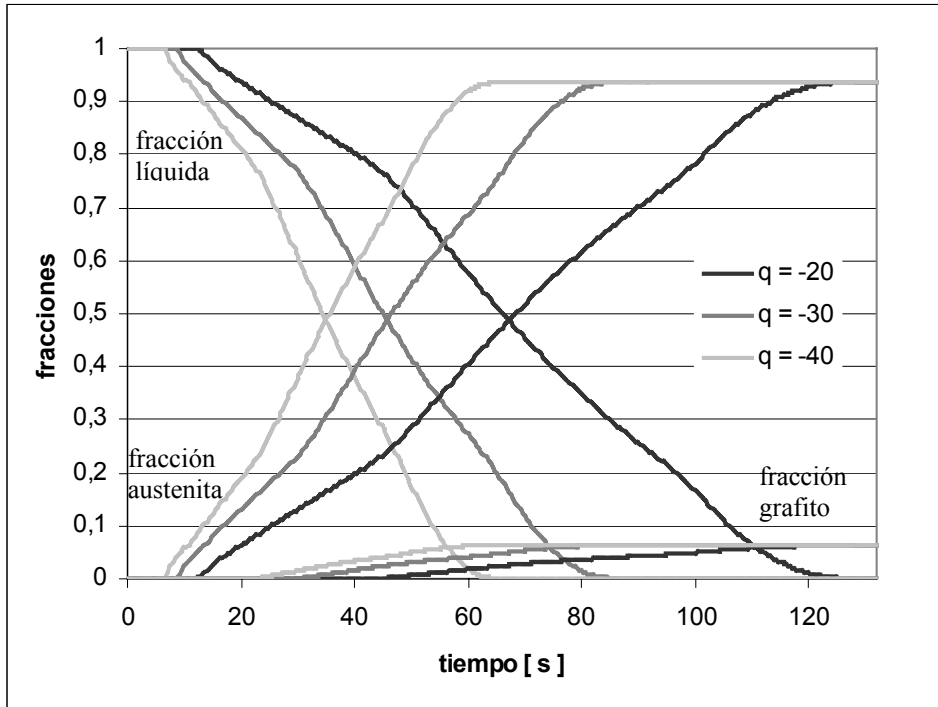


Figura VIII-30: Evolución en el tiempo de las fracciones de líquido, austenita y grafito.

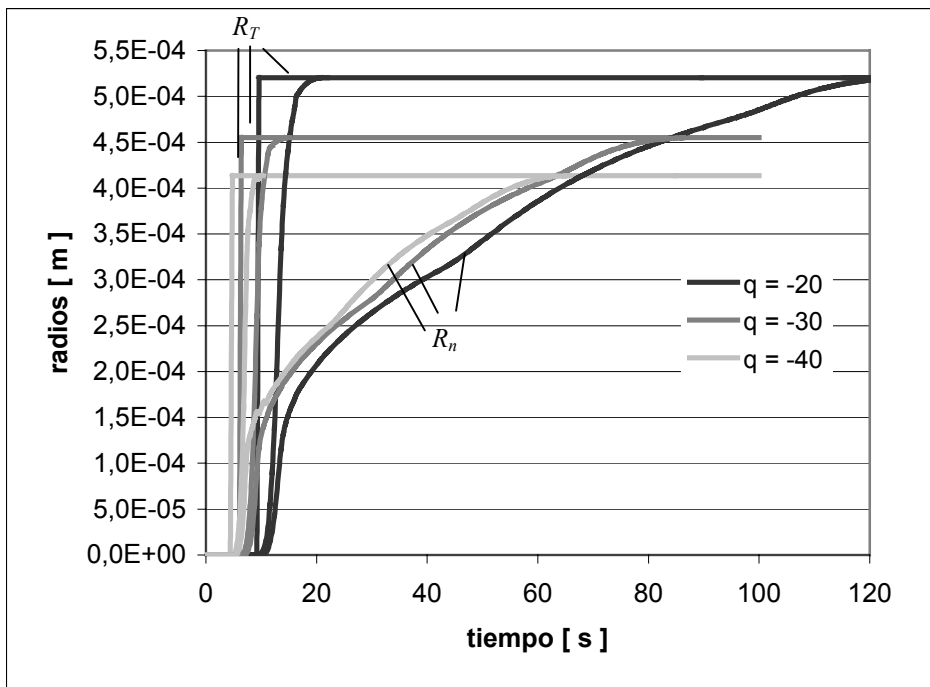


Figura VIII-31: Evolución de los radios  $R_T$ ,  $R_g$  y  $R_n$ .

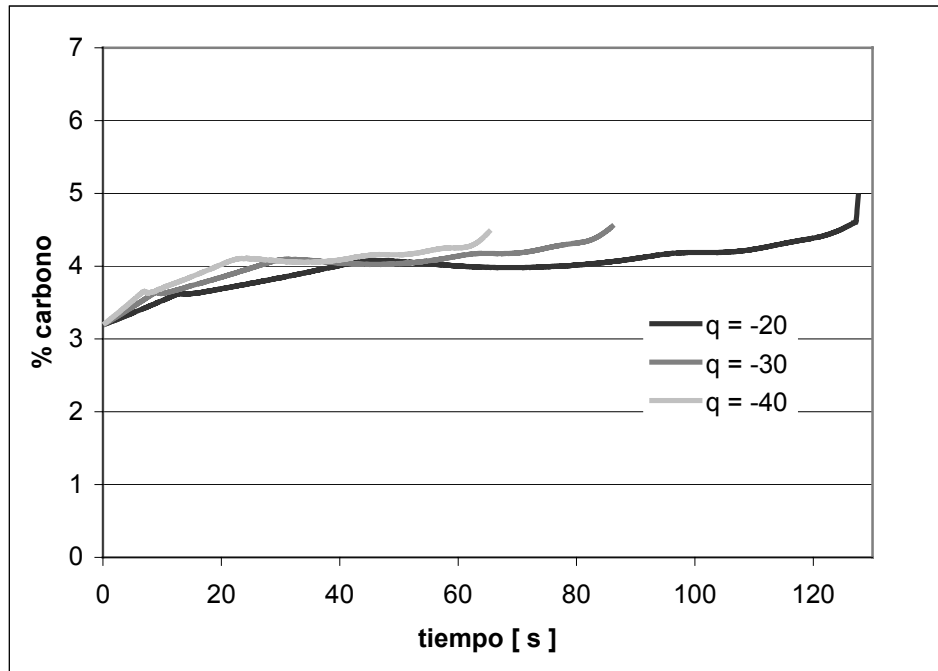


Figura VIII-32: Evolución de la concentración  $C^{l/\gamma}$ .

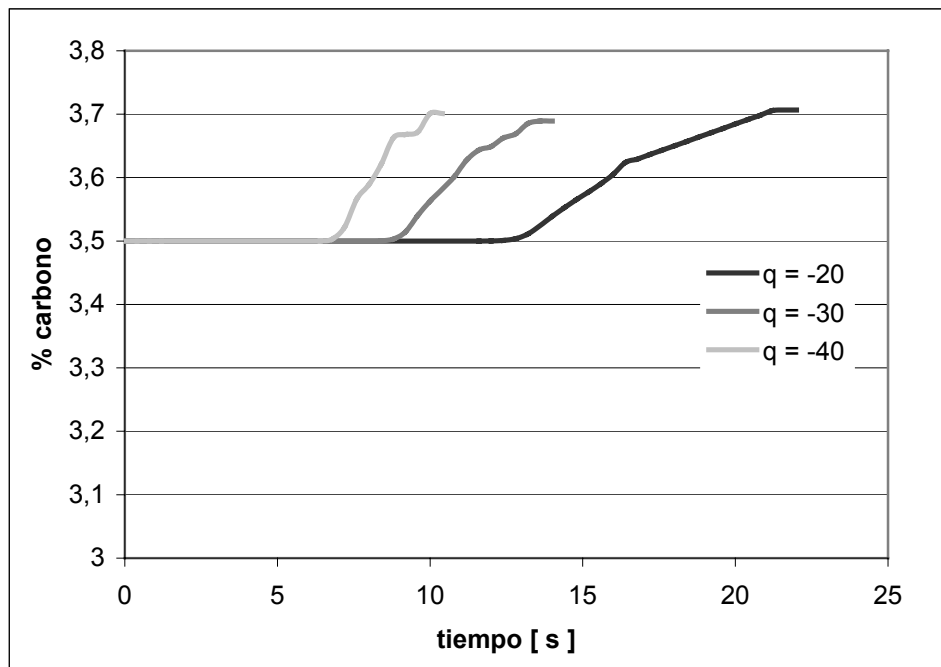


Figura VIII-33: Evolución de la concentración  $C_{pro}$ .

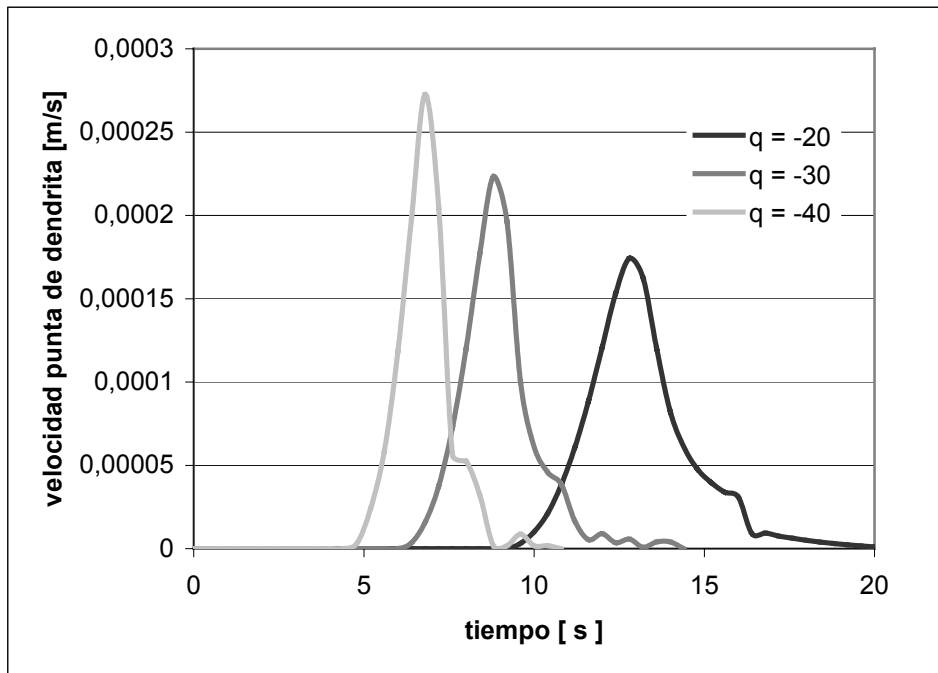


Figura VIII-34: Velocidad de la punta de las dendritas principales en función del tiempo.

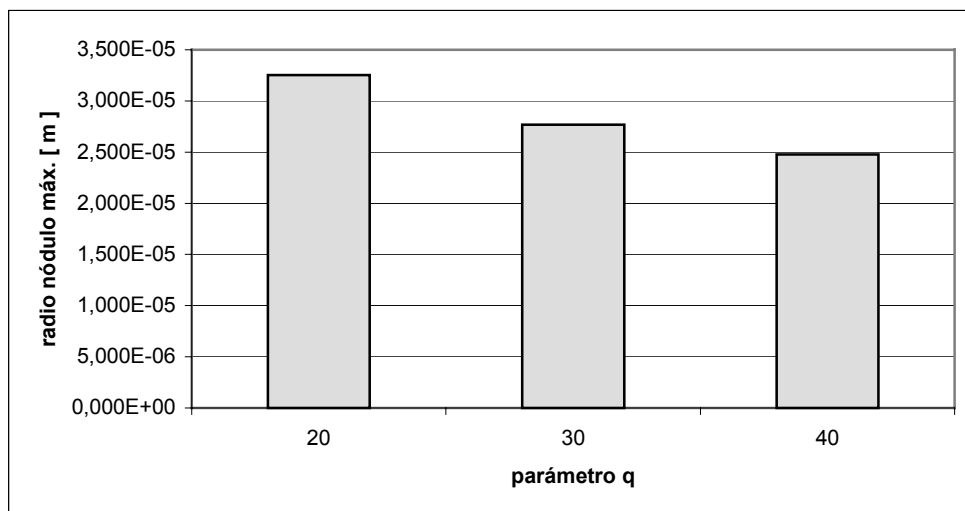


Figura VIII-35: Radio máximo de los nódulos de grafito.

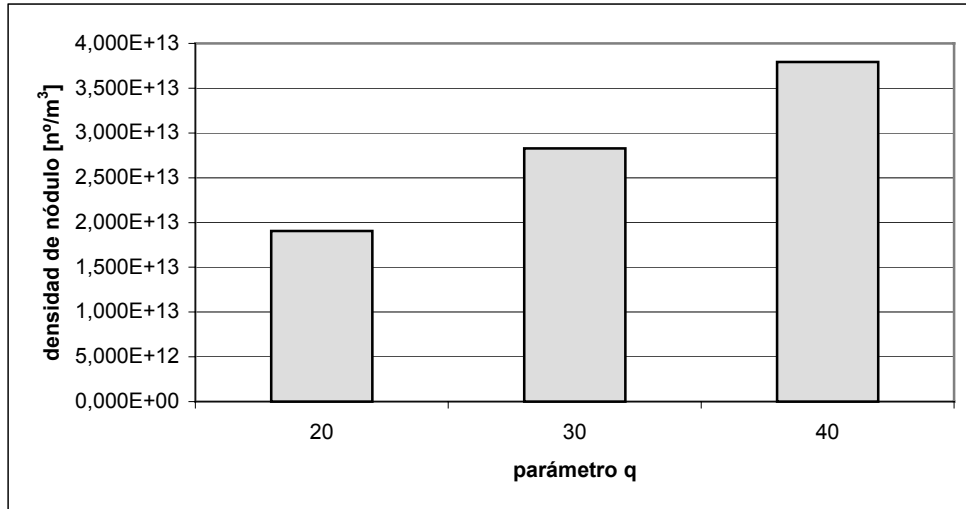


Figura VIII-36: Número de nódulos de grafito por metro cúbico de volumen.

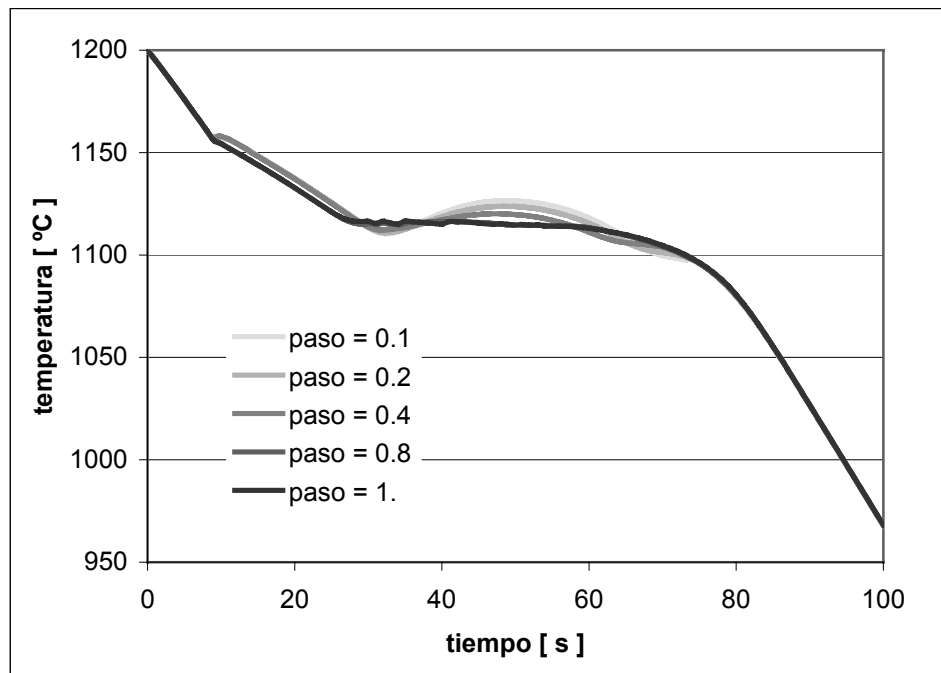


Figura VIII-37: Curvas de enfriamiento utilizando distintos pasos de tiempo.

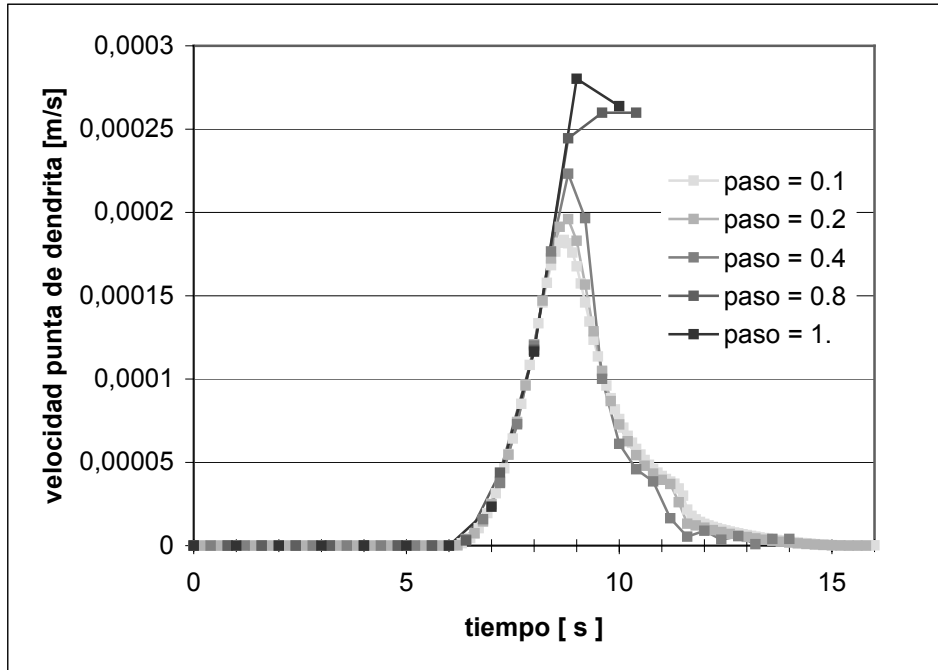


Figura VIII-38: Velocidad de crecimiento de la punta de las dendritas principales.

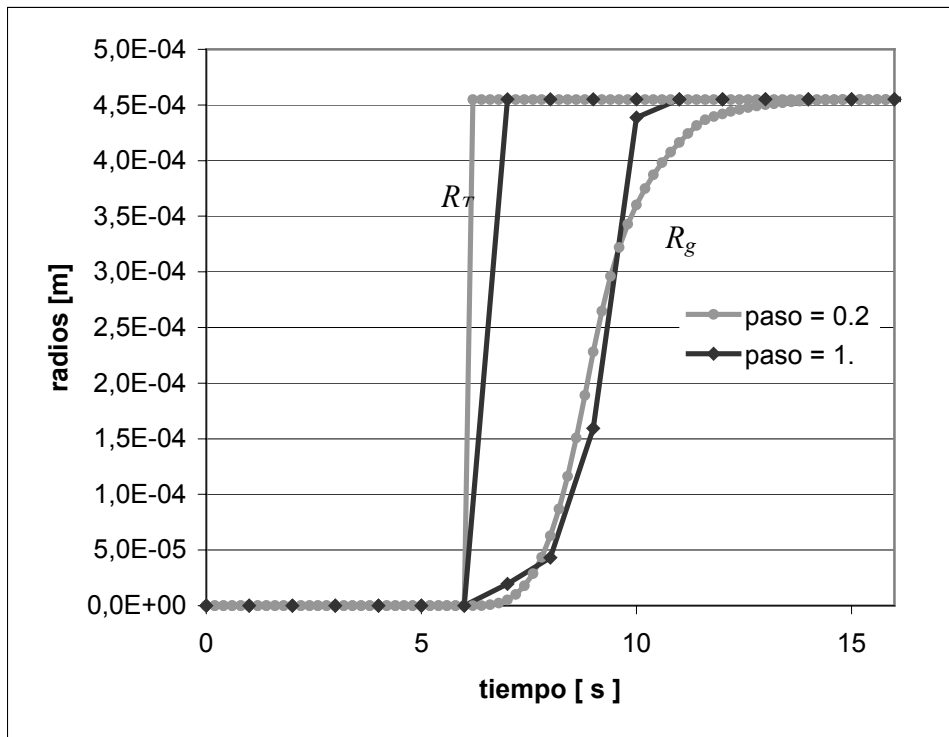


Figura VIII-39: Crecimiento de los radios  $R_T$  y  $R_g$ .

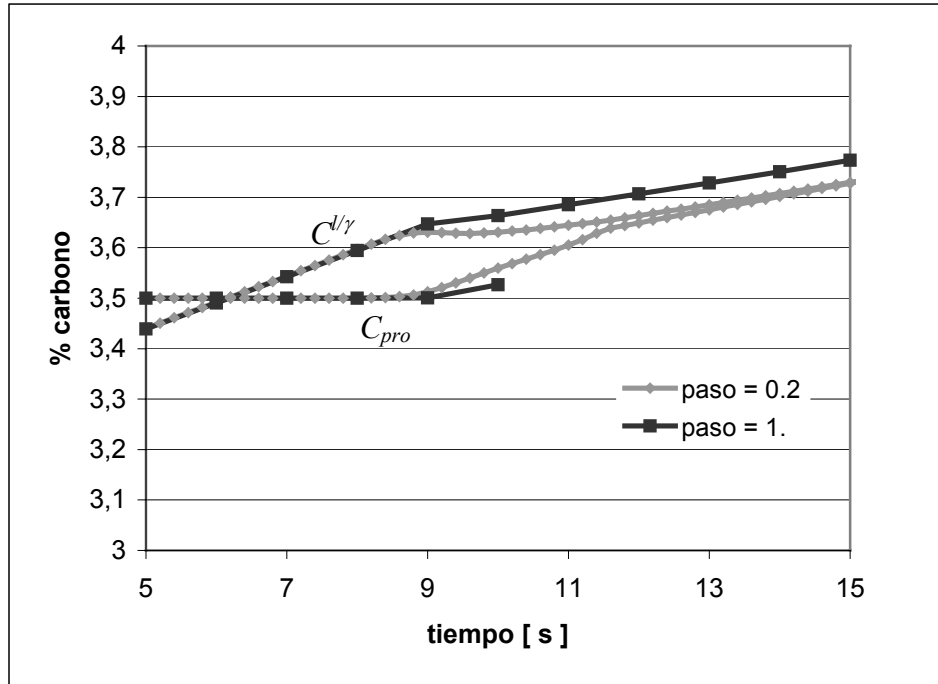


Figura VIII-40: Evolución de  $C^{\delta/\gamma}$  y de  $C_{pro}$ .

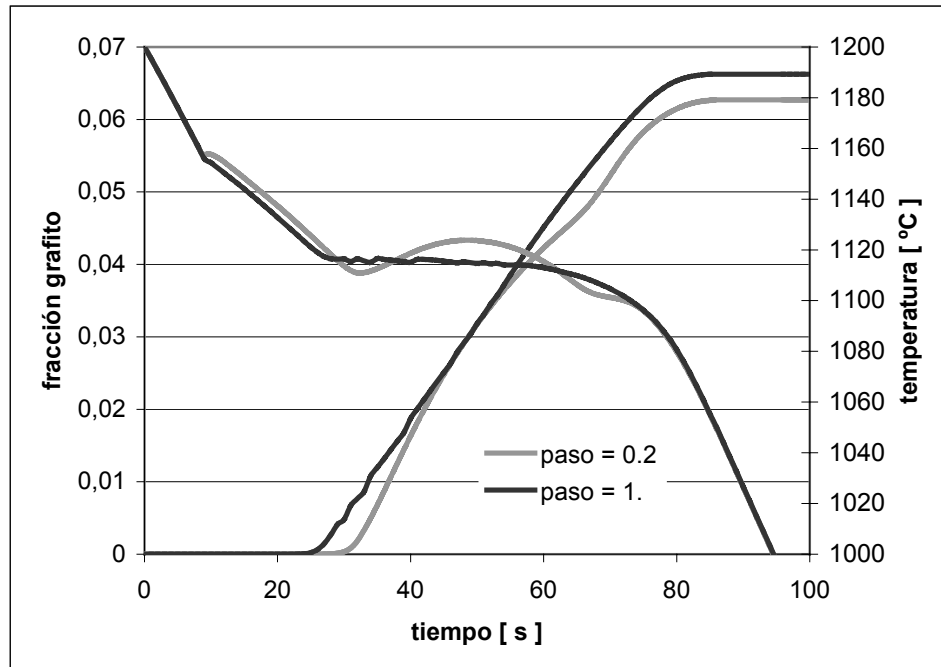


Figura VIII-41: Curvas de enfriamiento y de fracción de grafito.

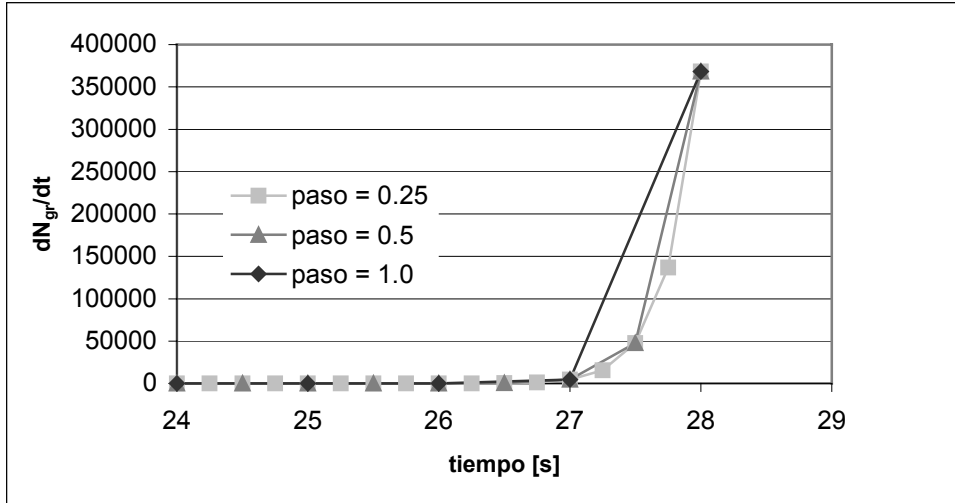


Figura VIII-42: Ejemplo de evolución de la velocidad de nucleación del grafito.

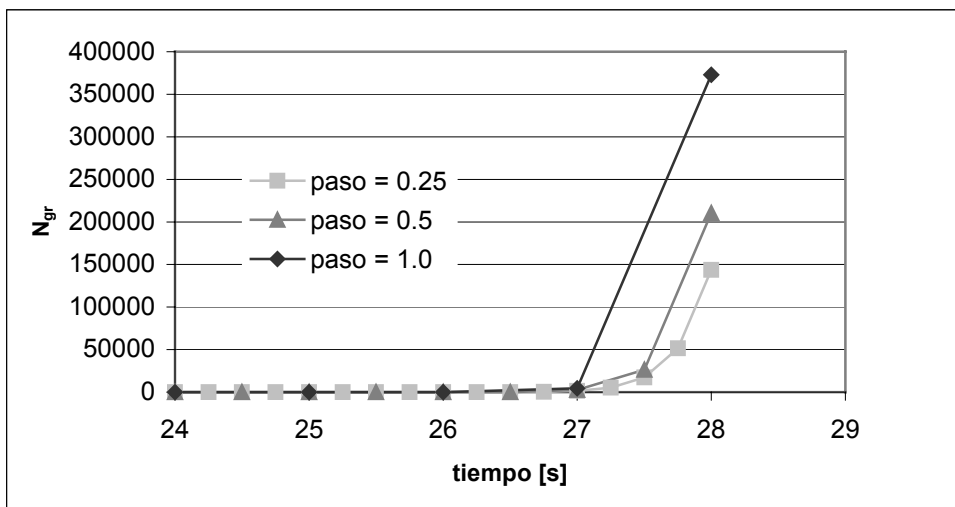


Figura VIII-43: Ejemplo de evolución de la de la densidad de nódulos de grafito.



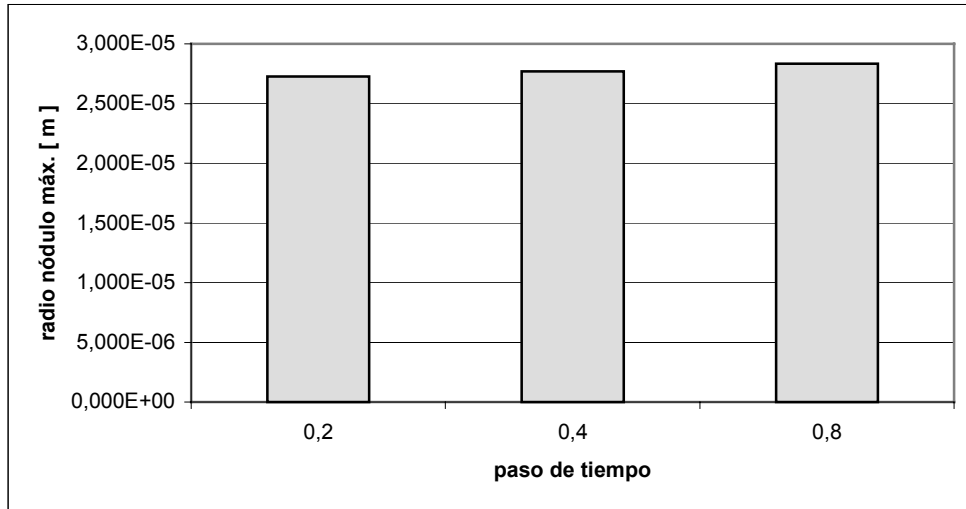


Figura VIII-44: Radio máximo de los nódulos de grafito.

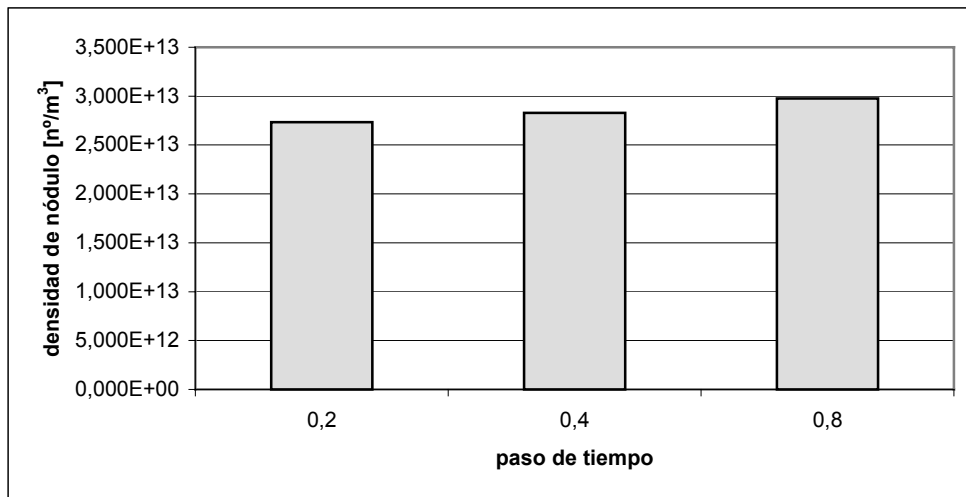


Figura VIII-45: Número de nódulos de grafito por metro cúbico de volumen.



## CAPÍTULO IX

### EJEMPLOS DE APLICACIÓN

#### IX.1. INTRODUCCIÓN

En este capítulo se analizan dos casos de solidificación de fundición dúctil utilizando los modelos presentados en los Capítulos IV, V y VII. Los resultados obtenidos se comparan entre sí y con curvas resultantes de mediciones experimentales. Los casos que se estudian corresponden a ensayos realizados por Boeri [6].

#### IX.2. PROBETA CILÍNDRICA DE 40 mm DE DIAMETRO (CASO I)

##### IX.2.1. Descripción

La probeta que se analiza es cilíndrica y ha sido colada en un molde de arena como se muestra en la Figura IX-1. En la base de la probeta se coloca material refractario y también se aísla la zona superior una vez que se ha terminado de colar. Esto, junto con el hecho de que la probeta es alargada, asegura que el flujo de calor en la parte central sea radial (Ver Ref. [25]). Las temperaturas se registran mediante dos termocuplas ubicadas a media altura, una en la superficie de la probeta y otra en su eje.

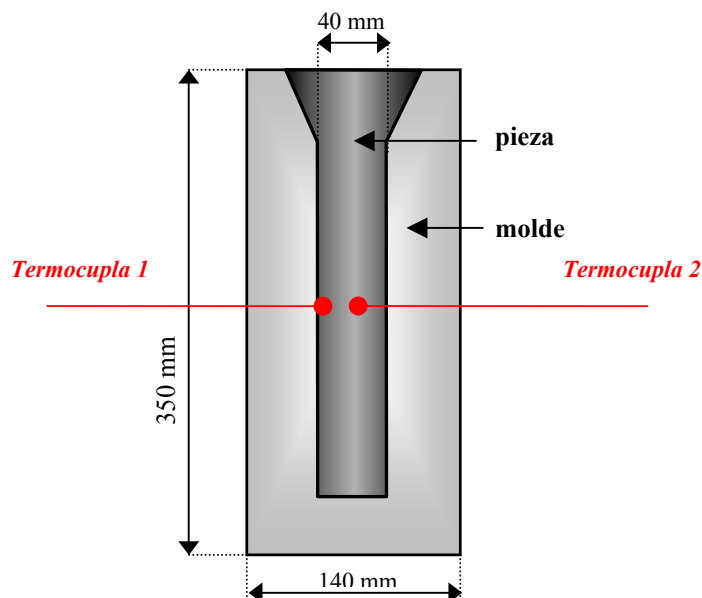


Figura IX-1: Caso I, esquema y dimensiones de la probeta

Por las características geométricas de la probeta y por la ubicación de las termocupas es posible realizar un análisis numérico equiaxial de una franja central delgada. La discretización se observa en la Figura IX-2.

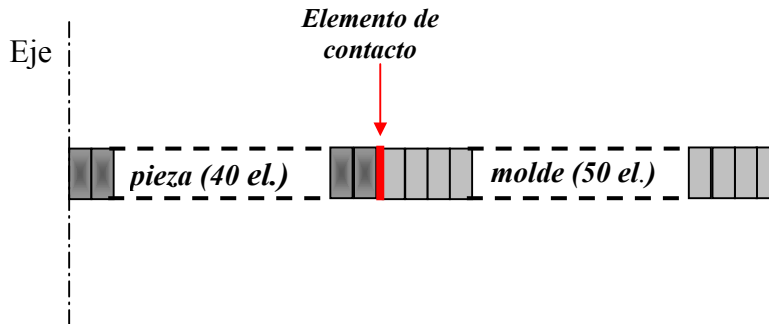


Figura IX-2: Caso I, discretización

El material de la probeta es fundición dúctil de composición eutéctica. Las propiedades se detallan en la Tabla IX.1. La temperatura ambiente y la temperatura inicial del molde de arena se consideran de 25 °C . La temperatura inicial de la aleación es de 1245 °C.

<b>FUNDICIÓN</b>	
Conductividad [W/m°C]:	sólido = 30, pastoso = 25, líquido = 30
Densidad [kg/m <sup>3</sup> ]:	7000
Calor específico [kJ/kg °C]:	$c_p = 0.61 + 1.214 \times 10^{-4} \times T$ para 777 °C < T ≤ 1130 °C $c_p = 0.915$ para T > 1130 °C
Calor latente [kJ/kg]:	185
Coef. de difusión del carbono [m <sup>2</sup> /s]:	en el líquido = $5.0 \times 10^{-10}$ en la austenita = $9.0 \times 10^{-11}$
Parámetros de nucleación grafito:	$b = 9.0 \times 10^{11}$ $c = 250$ ( T y B ) $A = 8.1E7$ $n = 2$ ( S )
Parámetro de nucleación austenita:	$A = 1.0 \times 10^{08}$ ( T )
<b>ARENA</b>	
Conductividad [W/m°C]:	1.1
Densidad [kg/m <sup>3</sup> ]:	1500
Calor específico [kJ/kg °K]:	$c_p = 0.782 + 5.71 \times 10^{-4} \times T - 1.88 \times 10^{-4} \times T^{-2}$ para T ≤ 846 °K $c_p = 1.00 + 1.35 \times 10^{-4} \times T$ para T > 846 °K

Tabla IX.1: Propiedades de los materiales.

### IX.2.2. Comparación de resultados experimentales y numéricos

La Figura IX-3 muestra las curvas de enfriamiento obtenidas experimentalmente y las que resultan del cálculo numérico realizado con el modelo plurinodular que se presenta en esta tesis (T). Se observa un muy buen ajuste entre las curvas correspondientes, tanto para el eje como para la superficie de la probeta. Las mesetas de las curvas se aproximan tanto en temperatura como en duración.

En la Figura IX-4 se analizan los resultados obtenidos mediante el modelo uninodular tal como fue planteado en el Capítulo IV (S). Puede verse que la principal diferencia con las curvas experimentales se presenta en la recalcificación que es más pronunciada en el análisis numérico, sobre todo en la curva de enfriamiento del eje de la probeta.

Las curvas correspondientes al cálculo realizado con el modelo plurinodular presentado en el Capítulo V (B) pueden compararse con las experimentales en la Figura IX-5. Se observa que la forma de las curvas es similar, sin embargo se aprecia un cierto desplazamiento hacia la izquierda de la curva numérica correspondiente al eje de la probeta en la que la meseta comienza y finaliza antes.

En la Figura IX-6, la Figura IX-7 y la Figura IX-8 puede verse la evolución con respecto al tiempo de las fracciones de líquido, de austenita y de grafito, para un punto ubicado a la mitad del radio.

Se observa que el modelo plurinodular correspondiente a esta tesis (T) y el modelo uninodular del Capítulo IV (S) presentan tiempos de solidificación similares mientras que el cambio de fase más lento se produce con el modelo plurinodular presentado en el Capítulo V (B). Si bien los dos modelos plurinodulares tienen la misma ley y las mismas constantes de nucleación se ve que al inicio de la solidificación la velocidad con la que disminuye la fracción líquida es más elevada en el modelo T, esto se debe a la nucleación independiente de la austenita.

Tanto las fracciones finales de austenita como las de grafito obtenidas con los dos modelos plurinodulares son iguales, mientras que del modelo uninodular resulta una fracción mayor de grafito y, consecuentemente, una fracción menor de austenita.

La Figura IX-9 muestra una comparación entre las densidades de nódulos de grafito obtenidas con los 3 modelos numéricos y experimentalmente, para un punto ubicado en la mitad del radio.

Es importante destacar que del conteo experimental resulta una densidad de nódulos por unidad de área, ya que la observación se realiza sobre una superficie plana resultante de un corte realizado en la probeta, por esta razón y para poder establecer una comparación con los resultados numéricos, que se expresan por unidad de volumen, se utiliza la función propuesta por Noguchi *et al.* [51] y utilizada por Boeri en su tesis doctoral [6] para transformar el número de nódulos por unidad de área  $N_A$  en número de nódulos por unidad de volumen  $N_V$ , tal como lo muestra la siguiente expresión

$$N_V = 10.6 N_A^{1.35} \quad (\text{IX-1})$$

Noguchi *et al.* [51] sostienen también que las distribuciones de área y de volumen de grafito son similares entre sí, produciéndose una leve diferencia para los tamaños de nódulos más grandes. Por esta razón la distribución de volumen de grafito resultante del cálculo se compara directamente con la distribución de área de grafito obtenida en la experimentación. De todos modos es importante aclarar que los tamaños de los nódulos calculados son los que corresponden al final de la solidificación pero, según lo expresado por algunos autores [6], los nódulos continúan creciendo debido a la precipitación del carbono que se produce como consecuencia de la disminución de la solubilidad del mismo en la matriz de hierro. Una fundición ferrítica admite un bajo contenido en carbono y los radios de los nódulos pueden sufrir un incremento de hasta un 16% después de la solidificación. Este incremento es menor si se produce la aparición de perlita [6].

En la Figura IX-10 se observa la distribución del área de grafito en función del radio de los nódulos según los resultados experimentales. Se ve que la mayor parte del área total de grafito corresponde a radios intermedios mientras que los nódulos de radios menores y mayores contribuyen en menor proporción a dicha área total. La mayor parte del grafito se presenta en nódulos de aproximadamente 18  $\mu\text{m}$  de radio. Se observan nódulos desde 4  $\mu\text{m}$  hasta 32  $\mu\text{m}$  de radio.

La Figura IX-11 muestra la distribución de volumen de grafito según el radio de los nódulos obtenida por cálculo utilizando el modelo plurinodular que se desarrolla en esta tesis. Se aprecia una cresta para un radio de aproximadamente 19  $\mu\text{m}$ . Se ve que a partir del máximo la distribución se extiende más hacia los radios menores que, por las características del modelo, corresponden a los nódulos que nuclean más tardíamente, mientras que hacia la derecha, en donde se ubican los radios mayores, cae más abruptamente. Esta asimetría resulta menos pronunciada en la distribución correspondiente a un punto más próximo a la superficie, tal como lo muestra la Figura IX-12 en la que se observa además una menor diferencia entre el radio mayor y el radio menor. Esto se comprende si se tiene en cuenta que más cerca de la superficie el tiempo de solidificación es menor.

La Figura IX-13 y la Figura IX-14 muestran las distribuciones calculadas, para un punto en el centro del radio, con los modelos propuestos por Boeri y Su. En ellas la distribución se corta en forma abrupta para los valores de radio menores y esto es debido a que en ambos modelos se considera que la nucleación se detiene cuando se produce la recalescencia. Este hecho ya fue observado también por Su *et al.* [74] y destacado en sus conclusiones considerando muy probable que la solidificación continuara aún después de la recalescencia. La probabilidad de una nucleación durante toda la solidificación o después de la meseta de la curva de enfriamiento también se menciona en otros trabajos [74,79].

La evolución de los radios  $R_T$ ,  $R_g$  y  $R_n$ , que sólo se calcula en el modelo plurinodular T, puede verse en la Figura IX-15. No se cuenta con valores experimentales registrados. Resulta oportuno resaltar que la medición del tamaño de grano de austenita es difícil de llevar a cabo debido a que, durante el enfriamiento, éstos desaparecen luego de la transformación eutectoide en la que se produce la nucleación y crecimiento de los granos de ferrita y perlita.

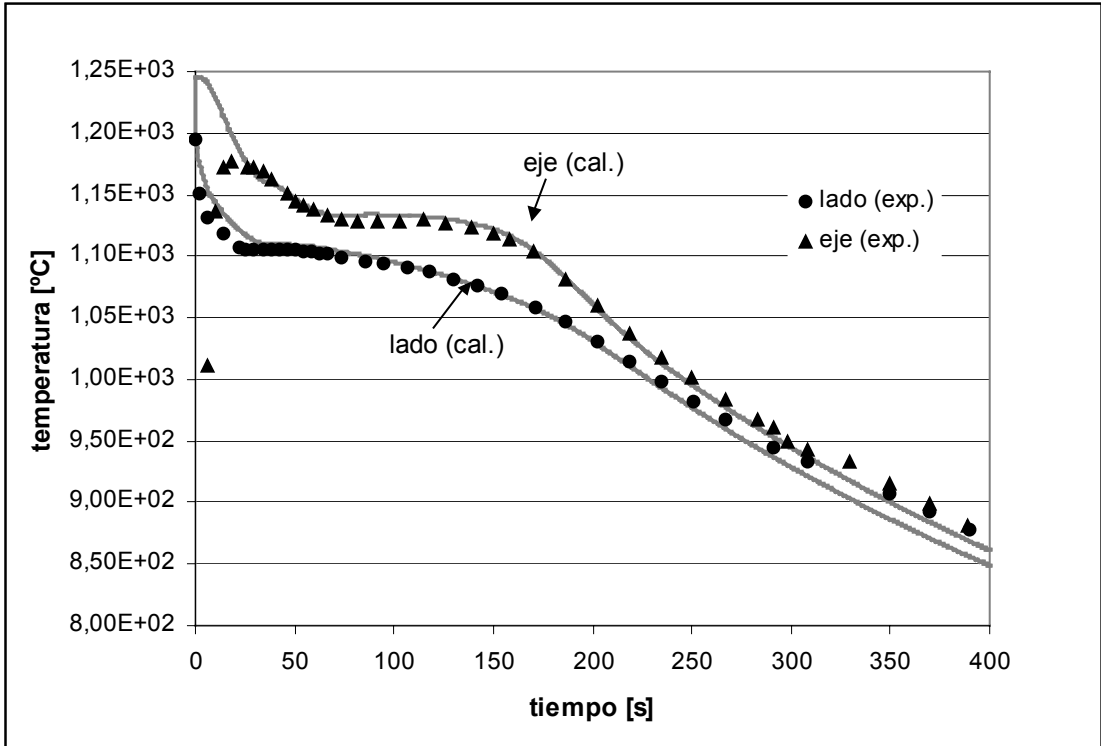


Figura IX-3: Caso I , curvas de enfriamiento experimentales y numéricas

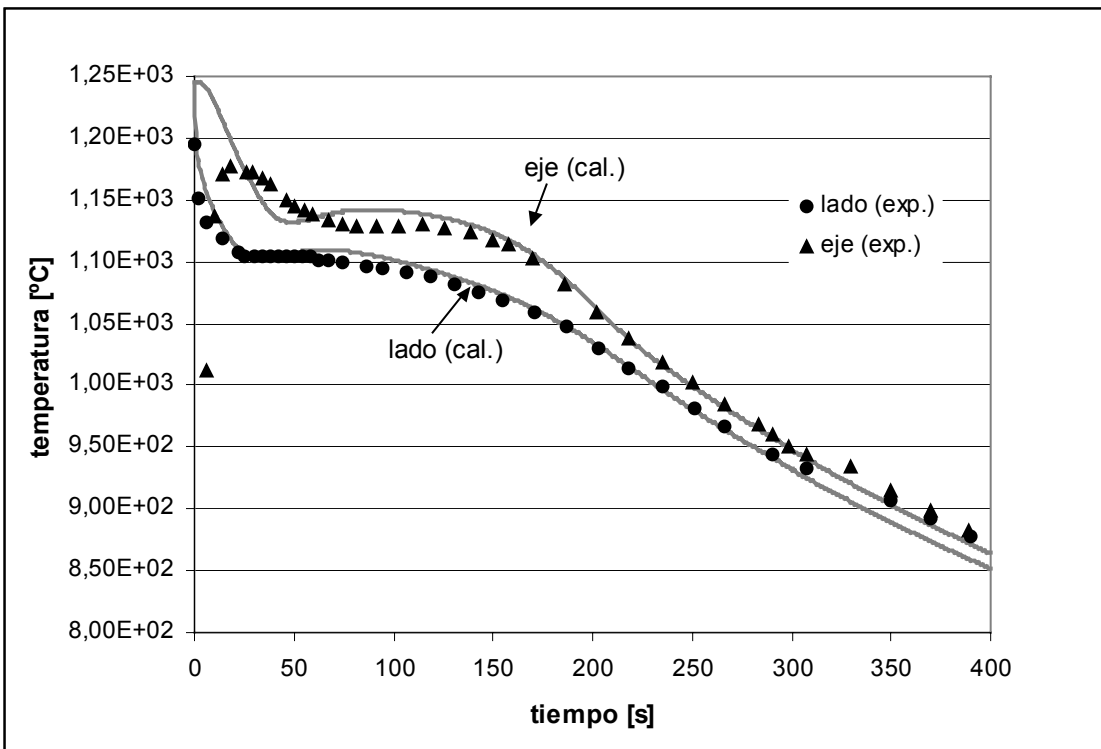


Figura IX-4: Caso I , curvas de enfriamiento experimentales y numéricas obtenidas con modelo uninodular.

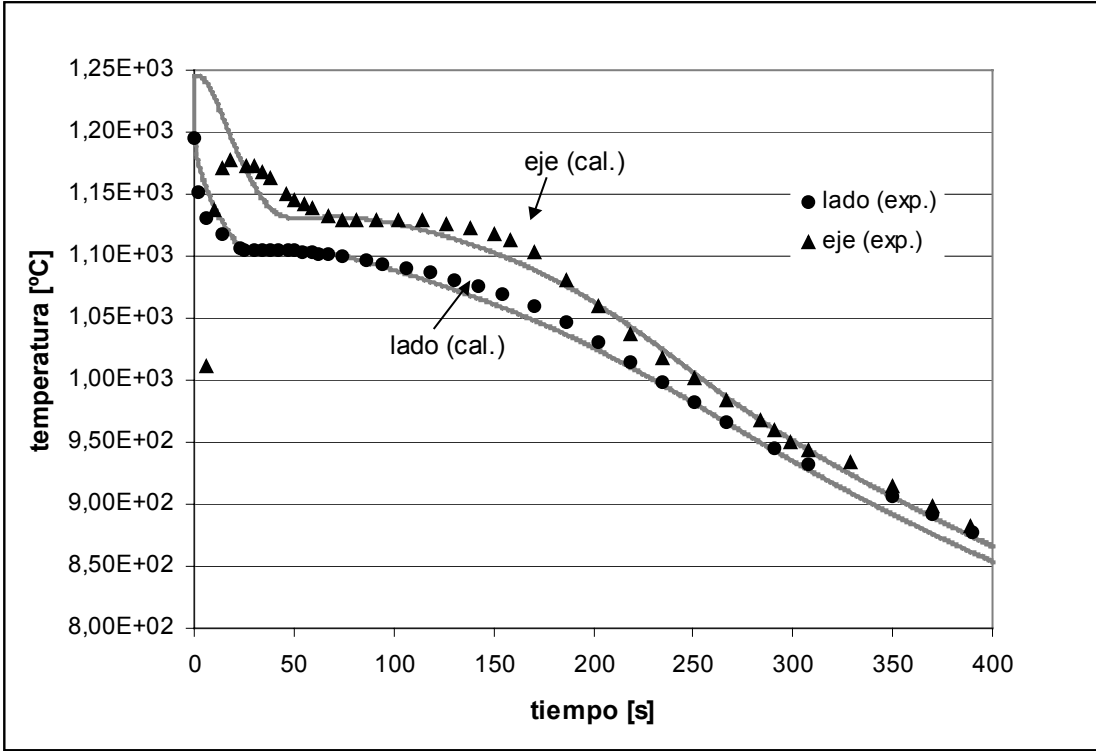


Figura IX-5: Caso I , curvas de enfriamiento experimentales y numéricas obtenidas con modelo plurinodular.

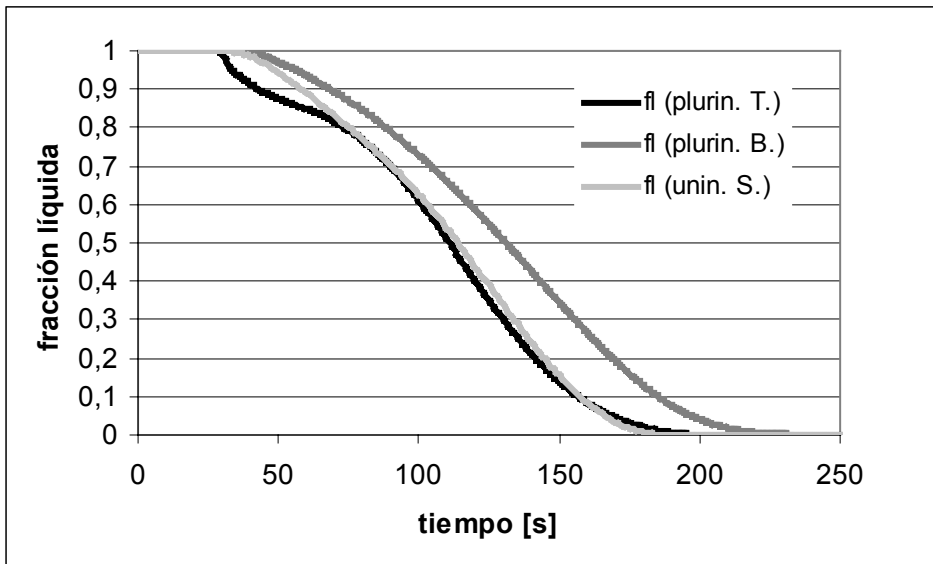


Figura IX-6: Caso I, evolución de la fracción líquida



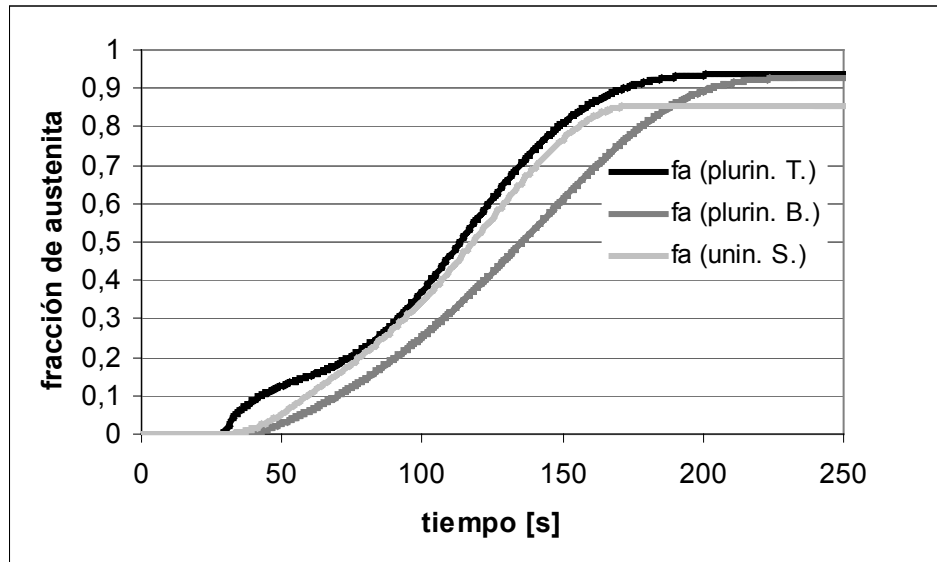


Figura IX-7: Caso I, evolución de la fracción de austenita

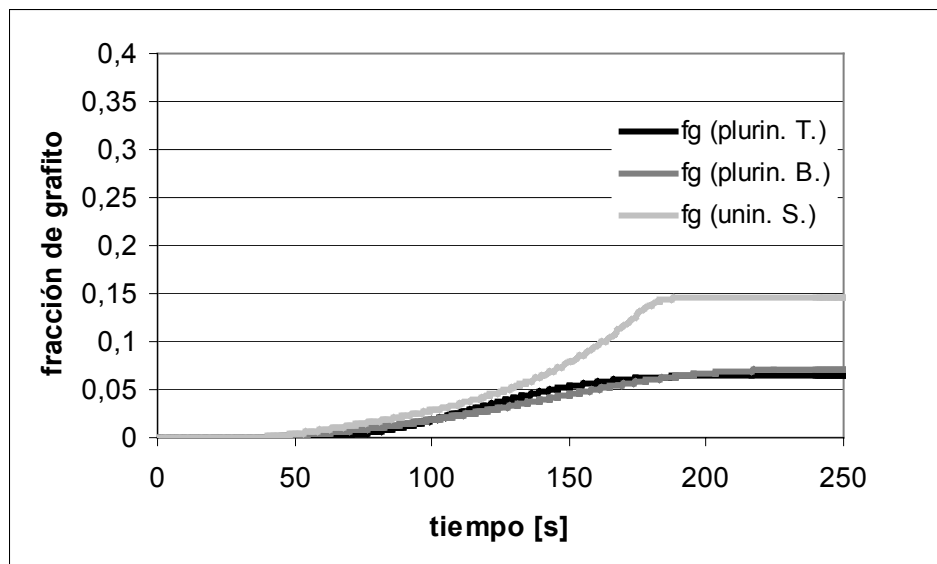


Figura IX-8: Caso I, evolución de la fracción de grafito

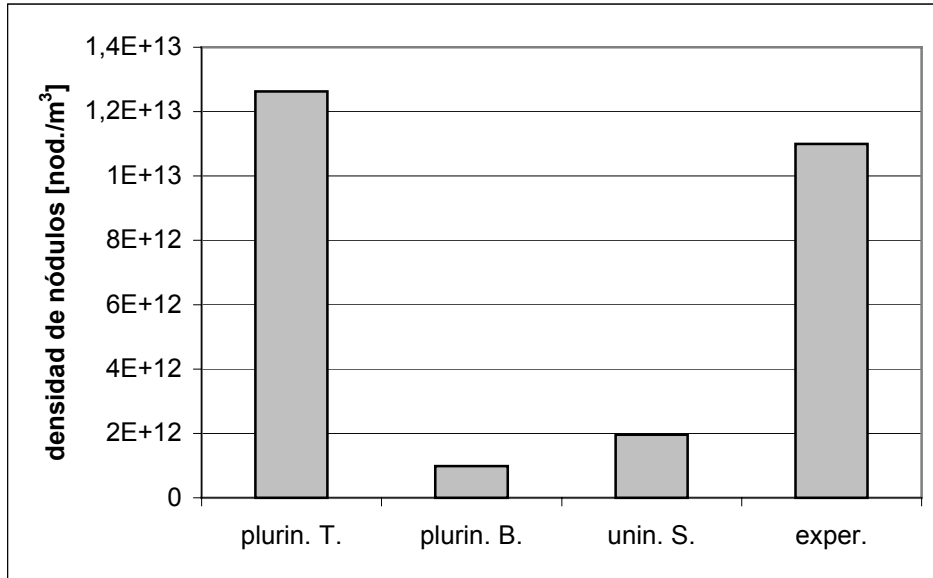


Figura IX-9: Caso I, densidad de nódulos según el modelo utilizado

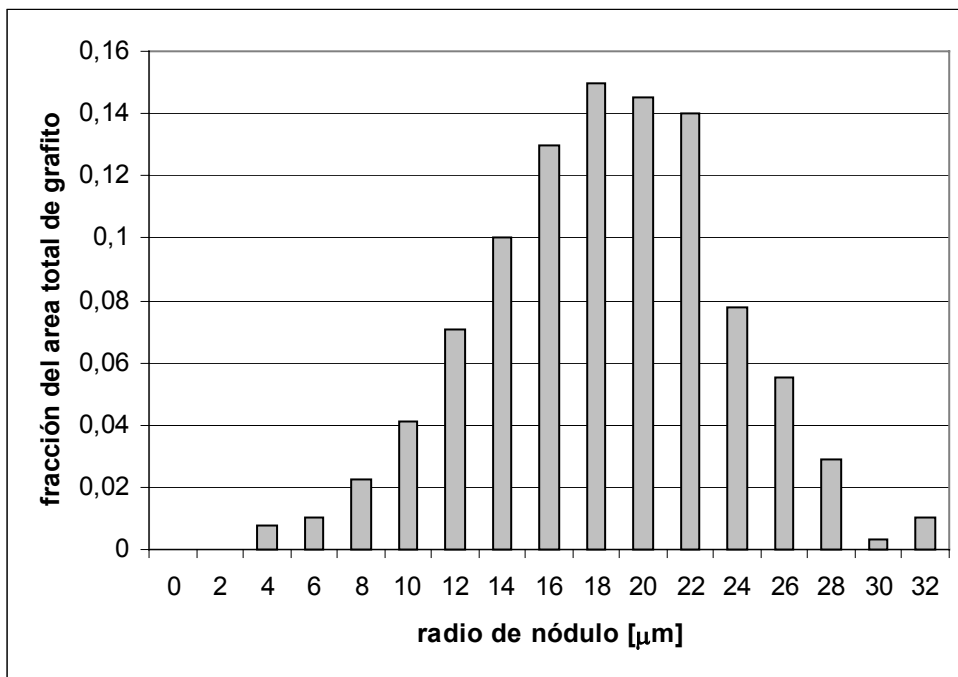


Figura IX-10: Caso I, distribución de área de grafito en función del radio de los nódulos. Experimental

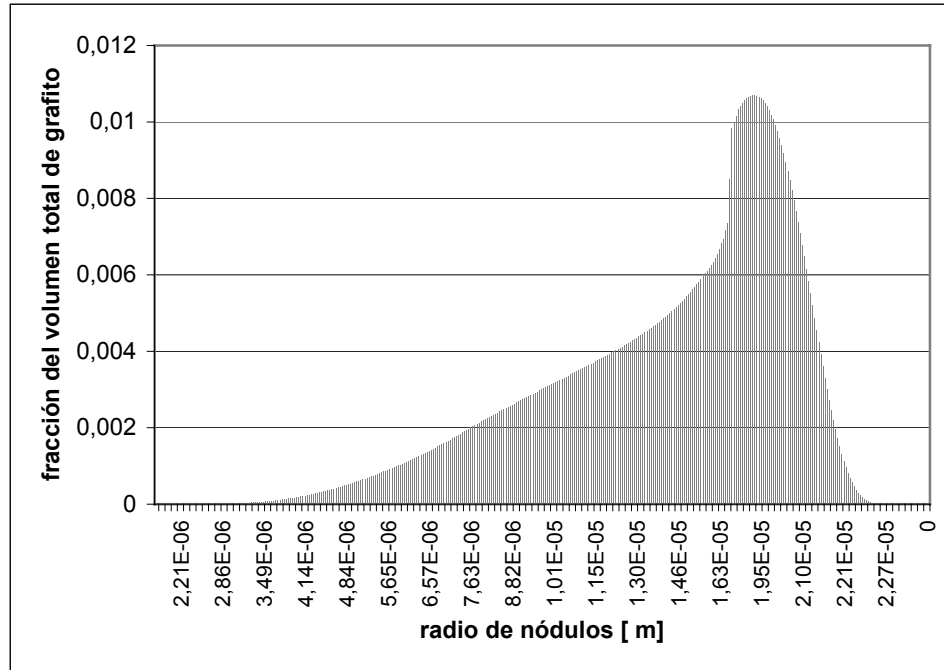


Figura IX-11: Caso I, distribución de volumen de grafito en función del radio de los nódulos. Modelo plurinodular (T)

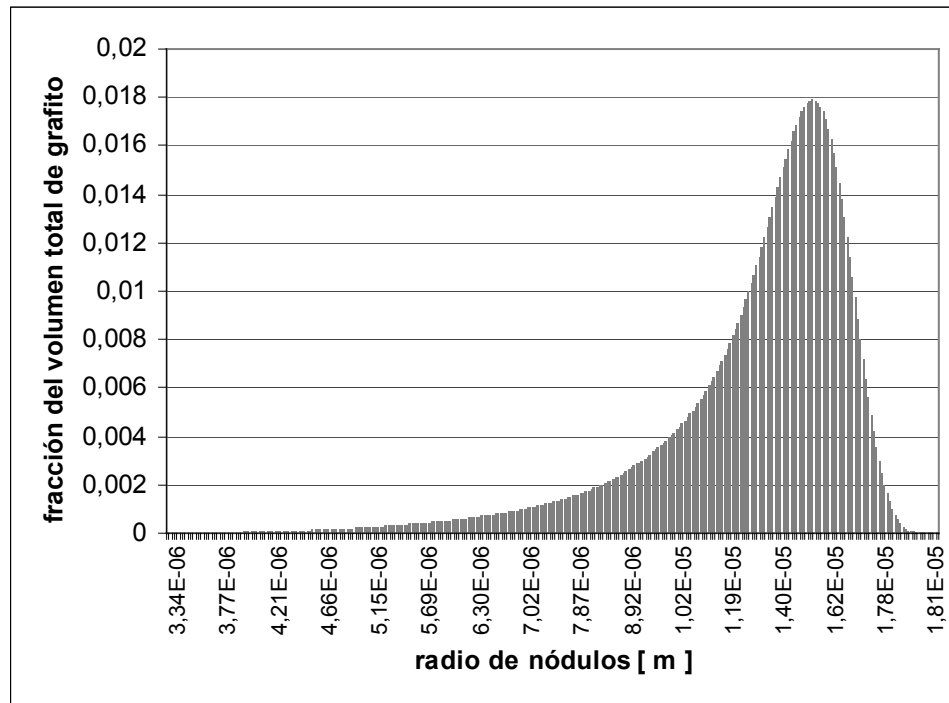


Figura IX-12: Caso I, distribución de volumen de grafito en función del radio de los nódulos para un punto sobre la superficie de la probeta. Modelo plurinodular (T)

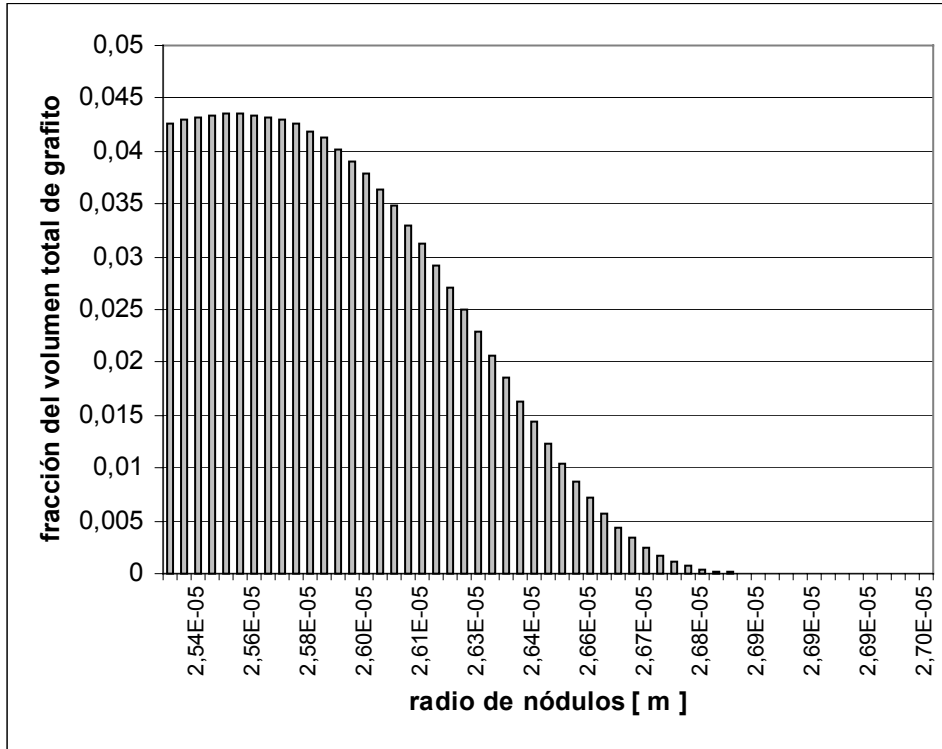


Figura IX-13: Caso I, distribución de volumen de grafito en función del radio de los nódulos. Modelo plurinodular (B)

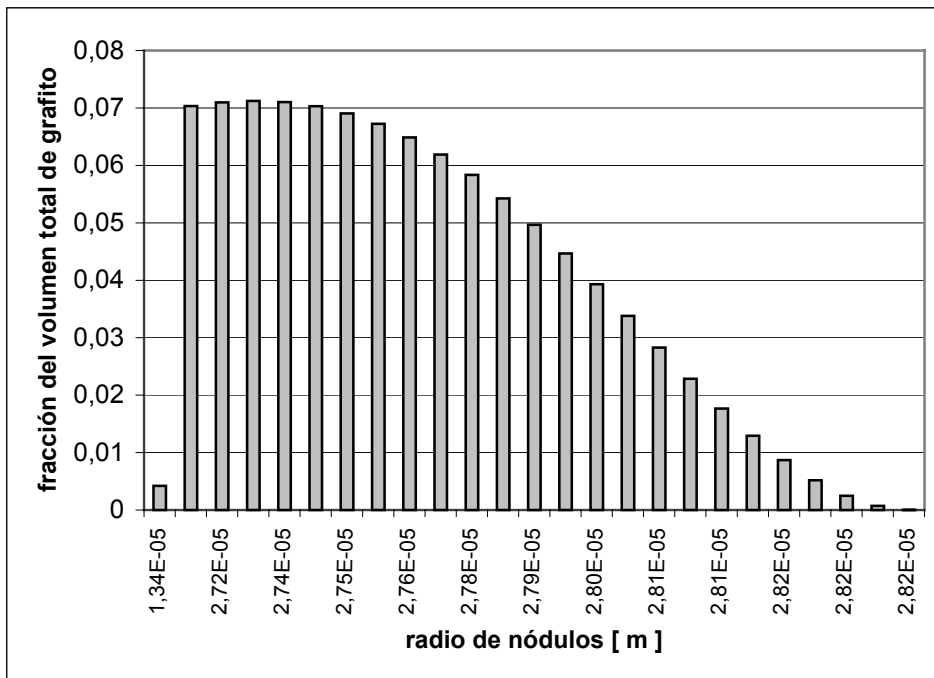


Figura IX-14: Caso I, distribución de volumen de grafito en función del radio de los nódulos. Modelo uninodular (S)

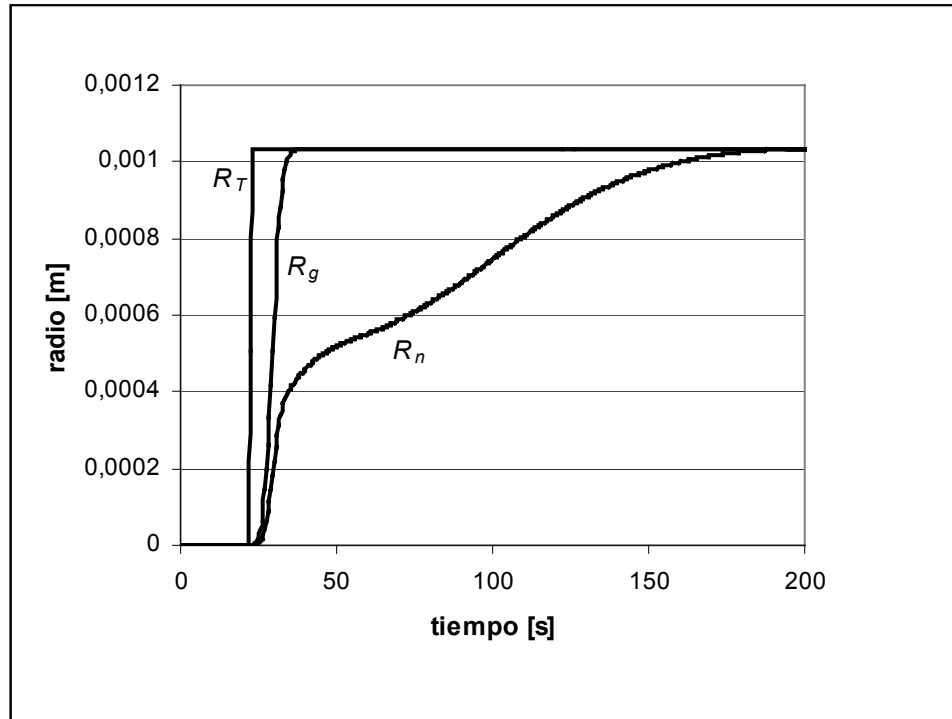


Figura IX-15: Caso I, evolución de los radios de austenita. Modelo plurinodular (T)

### IX.3. PROBETA CILÍNDRICA DE 80 mm DE DIÁMETRO (CASO II)

#### IX.3.1. Descripción

La probeta que se analiza en este caso se esquematiza en la Figura IX-16.

Se utilizan tres termocuplas que registran la evolución de la temperatura a una altura media de la probeta en tres puntos: sobre la superficie, en el medio del radio y en el eje de la probeta. A través de un serpentín que se ubica alrededor del cilindro fundido se hace circular agua para contribuir al enfriamiento del sistema.

Para este segundo caso también se realiza un análisis numérico equiaxial de una estrecha franja ubicada a media altura de la probeta. No se discretiza el ancho total del molde sino un pequeño espesor de 10 mm comprendido entre la pieza y el serpentín y se considera una temperatura del entorno de 25 °C, asignándole a la conductancia un valor más elevado que el del Caso I. Ver Figura IX-17. La temperatura inicial de la aleación es 1245 °C. La conductividad de la fundición en estado líquido se considera mayor que la utilizada en el Caso I.

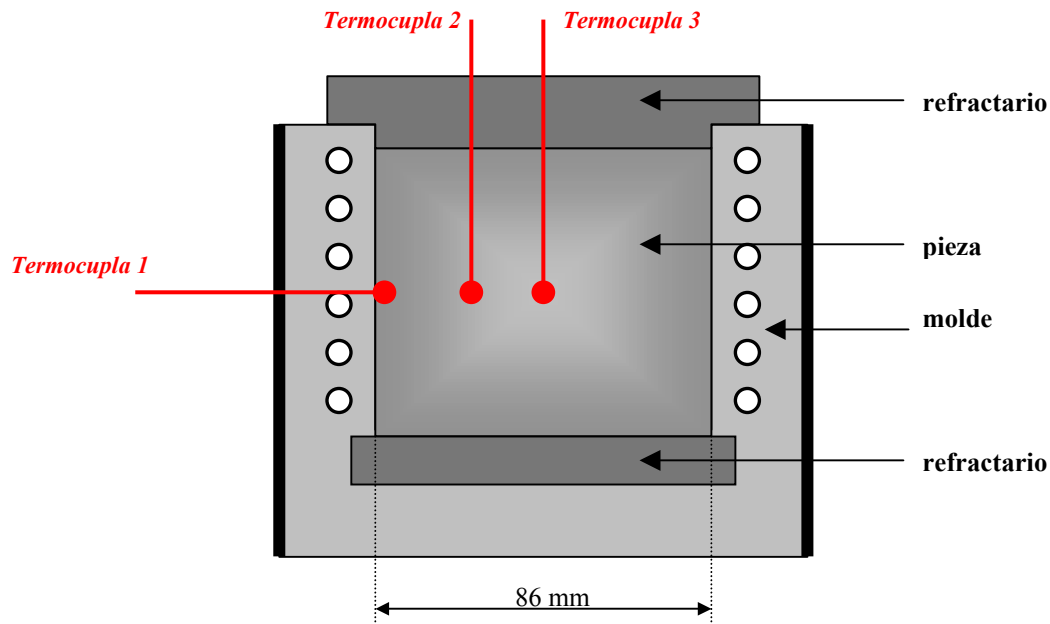


Figura IX-16: Caso II, esquema y dimensiones de la probeta

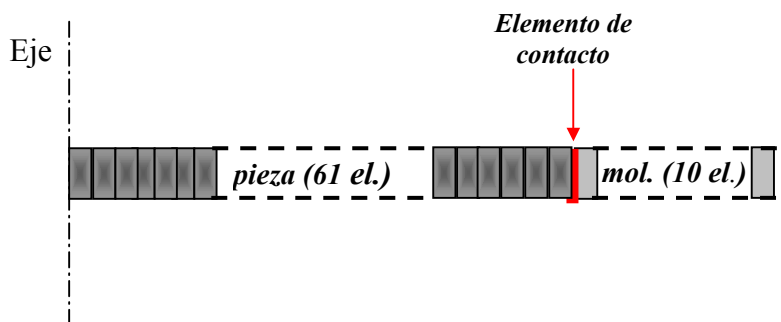


Figura IX-17: Caso II, discretización

### IX.3.2. Comparación de resultados experimentales y numéricos

En la Figura IX-18 se muestra el enfriamiento registrado experimentalmente y el calculado de tres puntos de la probeta: en la superficie, en el medio del radio y en el eje. En la Figura IX-19 se realiza una ampliación de la zona de mayor interés. Como es posible apreciar existe un buen ajuste entre las curvas correspondientes. El ajuste conseguido con los modelos uninodular (S) y plurinodular (B) es menor, tal como se ve en la Figura IX-20 y la Figura IX-21 respectivamente, siendo los alejamientos entre las curvas del cálculo y las empírica de las mismas características que para el Caso I.

En la Figura IX-22, la Figura IX-23 y la Figura IX-24 puede verse la evolución de las fracciones de líquido, de austenita y de grafito con respecto al tiempo para un punto ubicado a la mitad del radio.

Al igual que para el Caso I el modelo plurinodular B presenta el mayor tiempo de solidificación. También ocurre que tanto las fracciones de austenita como las de grafito obtenidas con los dos modelos plurinodulares son iguales, mientras que del modelo uninodular resulta una fracción mayor de grafito y una menor de austenita.

La Figura IX-25 muestra una comparación entre las densidades de nódulos de grafito obtenidas con los modelos numéricos y experimentalmente, para tres puntos: uno ubicado en las proximidades del eje, otro en la mitad del radio y otro cercano a la superficie de la probeta. En este caso todas las densidades obtenidas numéricamente son menores que la empírica. La variación relativa en la densidad de los tres puntos obtenida mediante el modelo plurinodular T es similar a la que muestran los resultados empíricos, mientras que presentan un orden inverso para los otros dos modelos.

Desde la Figura IX-26 hasta la Figura IX-29 pueden verse las distribuciones de área de grafito y de volumen de grafito resultantes de los experimentos y de los cálculos según los tres modelos y para tres puntos: uno próximo al eje, otro en la mitad del radio y otro cercano a la superficie.

Los resultados empíricos muestran una distribución comprendida, aproximadamente, entre los radios de 4  $\mu\text{m}$  y 32  $\mu\text{m}$ , correspondiendo la máxima fracción de área a los nódulos de radio 18  $\mu\text{m}$  para los puntos cercano al eje y en la mitad del radio, y de 22  $\mu\text{m}$  para un punto próximo a la superficie.

El rango de radios entre los que se distribuye el volumen de grafito en los gráficos del modelo plurinodular T es similar al experimental. Sin embargo, para el eje y para el centro del radio los gráficos presentan dos máximos relativos. La distribución correspondiente al punto próximo a la superficie presenta gran similitud con la registrada experimentalmente tanto en la forma como en el valor de radio al que corresponde la máxima fracción de volumen.

Como era de esperar, debido a las bajas densidades de nódulo resultantes, los valores de los radios entre los cuales se reparte el volumen de grafito en los modelos numéricos B y S son mayores.

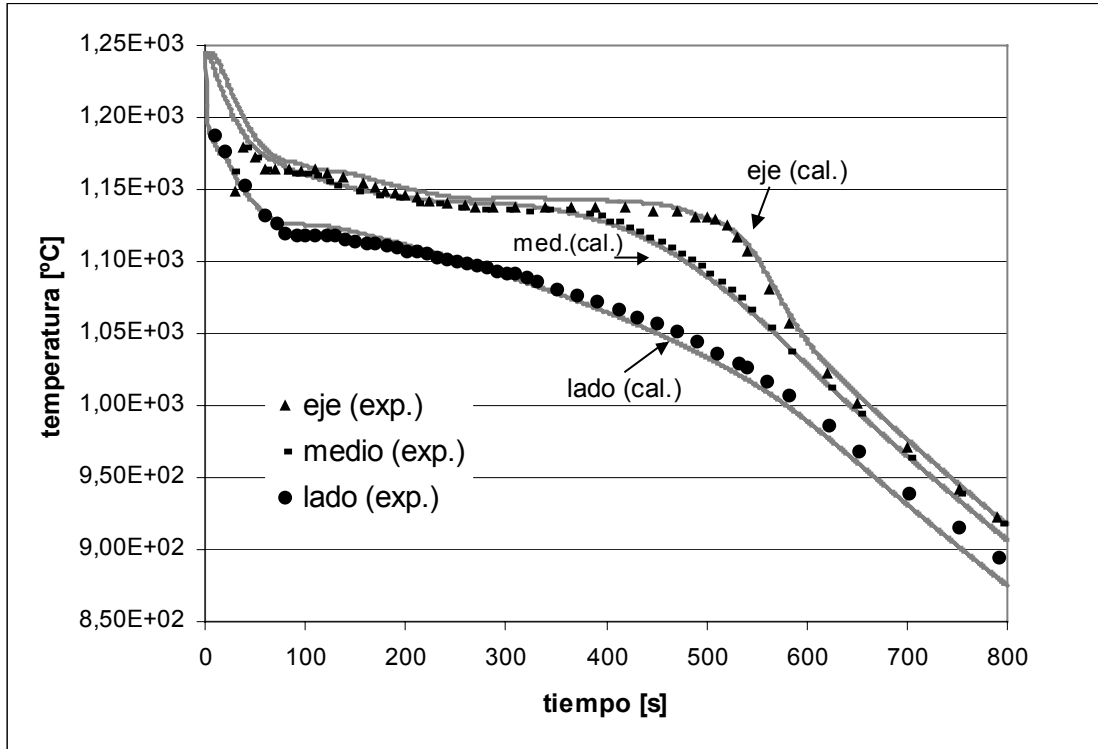


Figura IX-18: Caso II, curvas de enfriamiento experimentales y numéricas (Modelo plurinodular T).

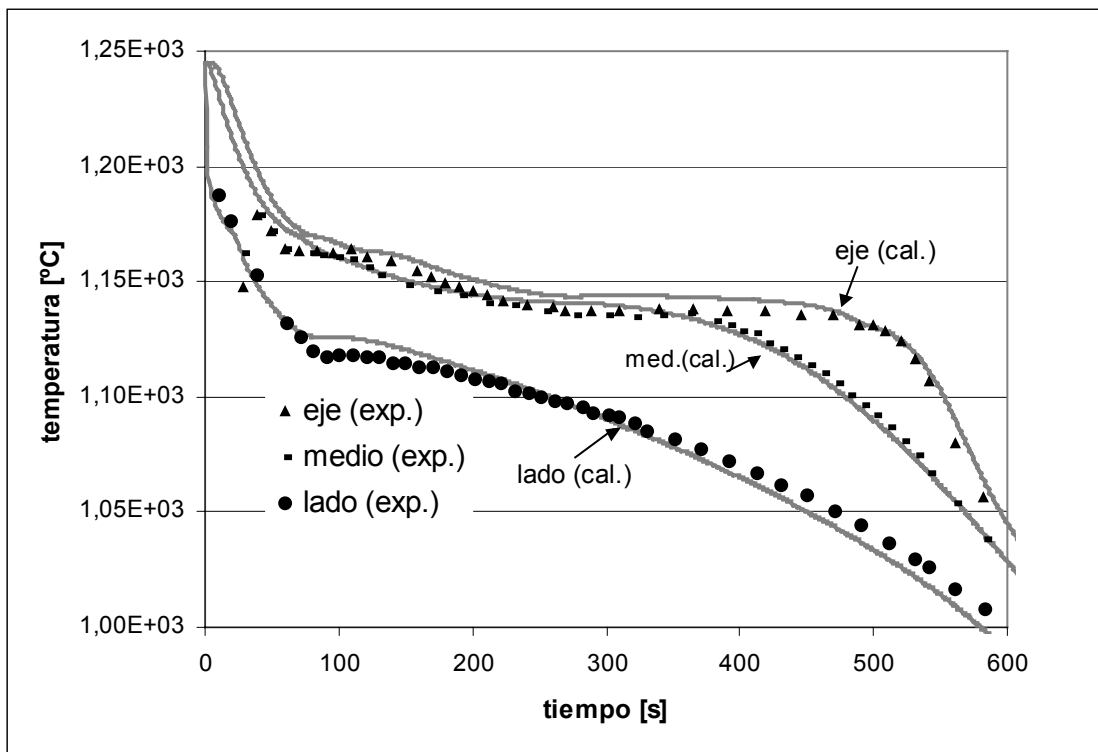


Figura IX-19: Caso II, curvas de enfriamiento experimentales y numéricas (Ampliación).



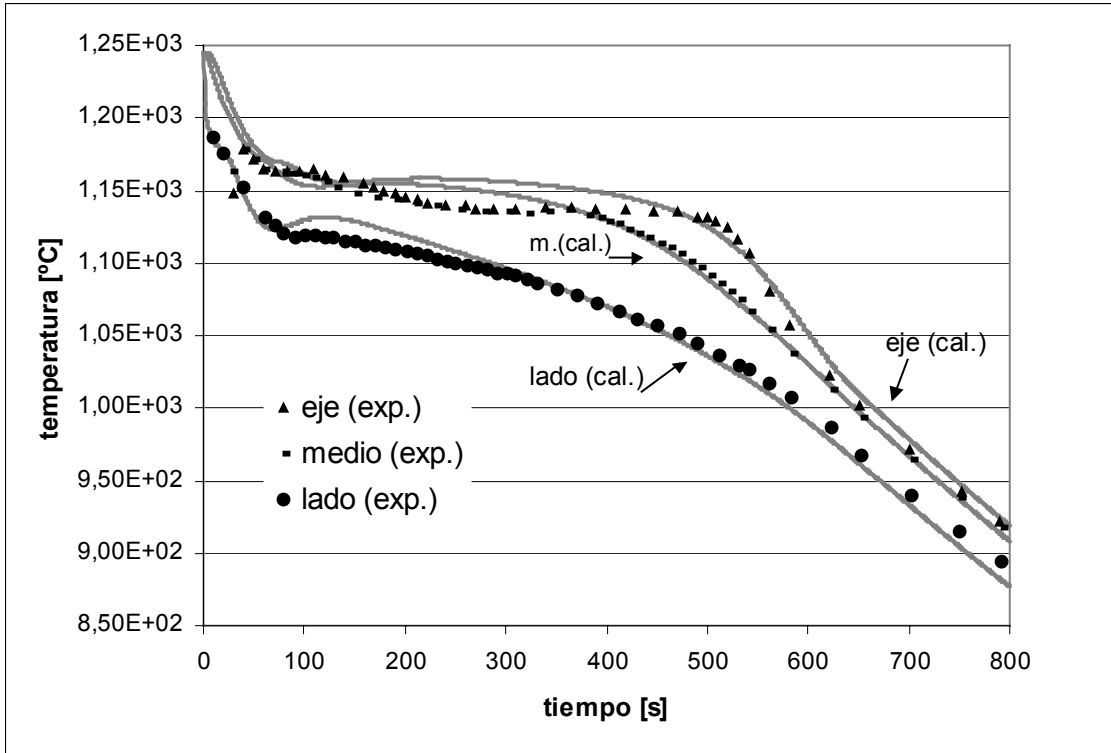


Figura IX-20: Caso II, curvas de enfriamiento experimentales y numéricas (Modelo uninodular S).

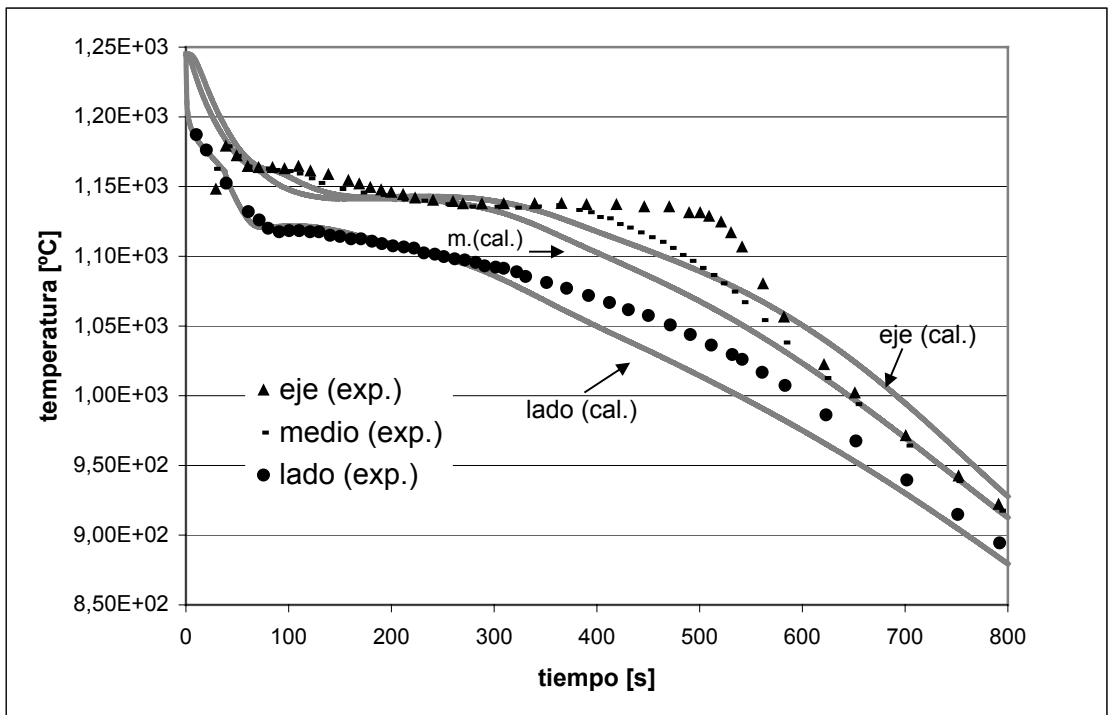


Figura IX-21: Caso II, curvas de enfriamiento experimentales y numéricas (Modelo plurinodular B).

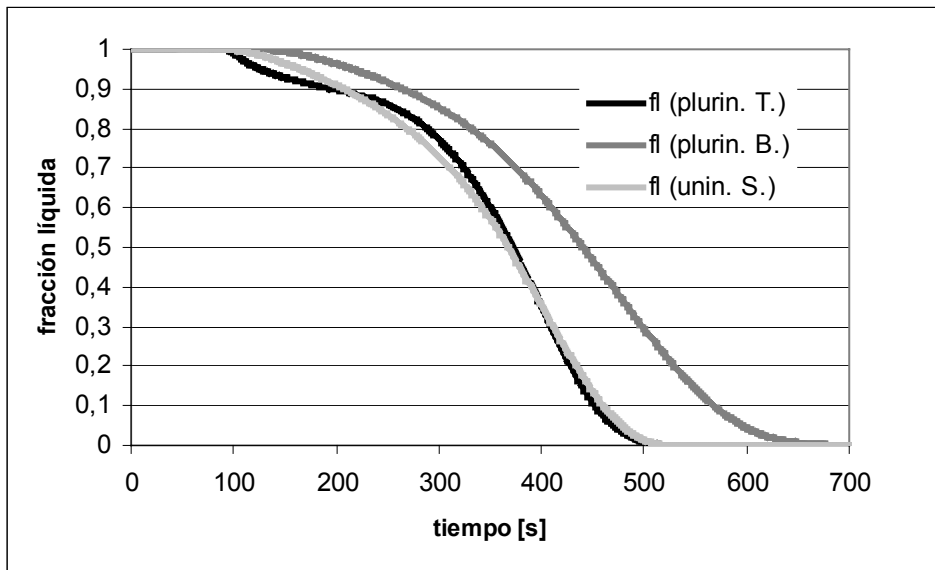


Figura IX-22: Caso II, evolución de la fracción líquida.

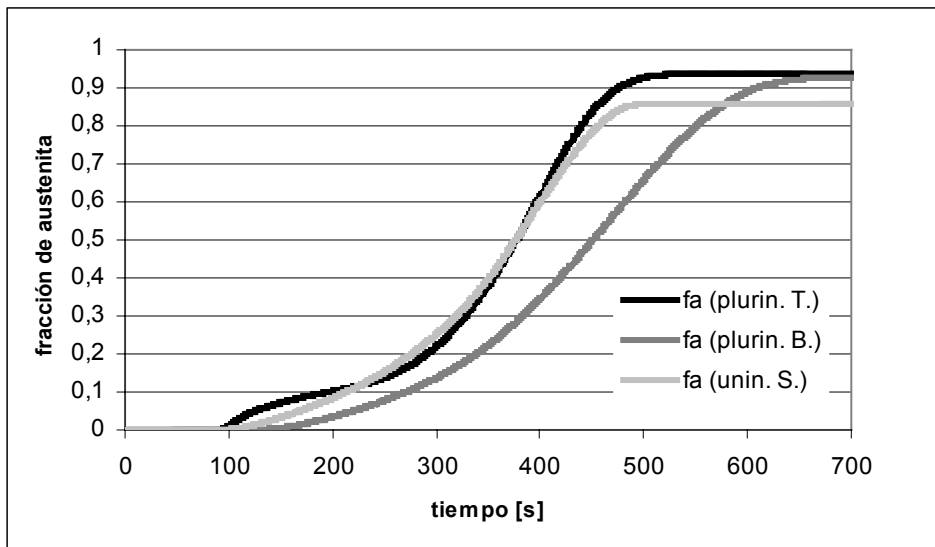


Figura IX-23: Caso II, evolución de la fracción de austenita.

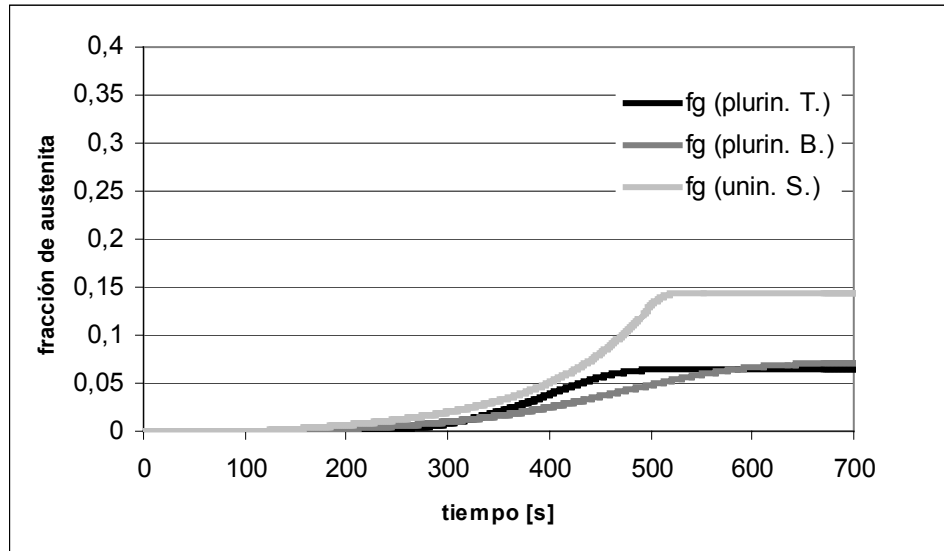


Figura IX-24: Caso II, evolución de la fracción de grafito

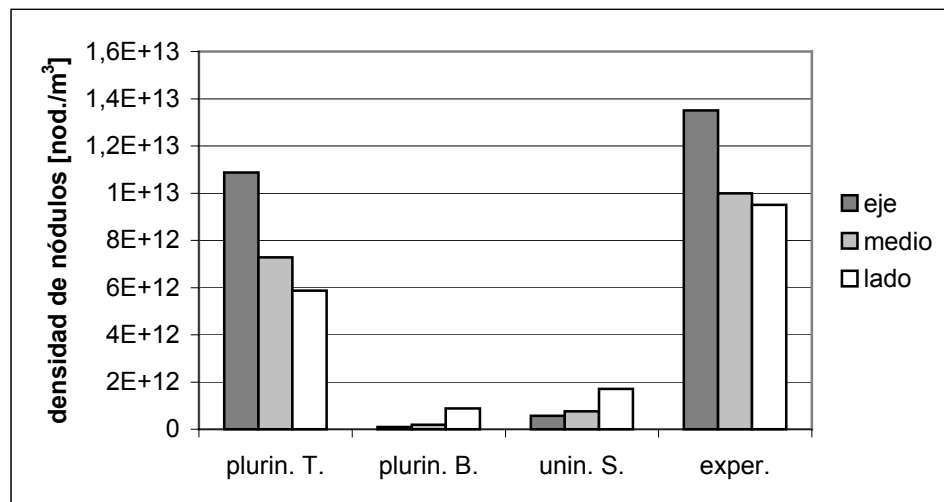


Figura IX-25: Caso II, densidad de nódulos para tres puntos según el modelo.

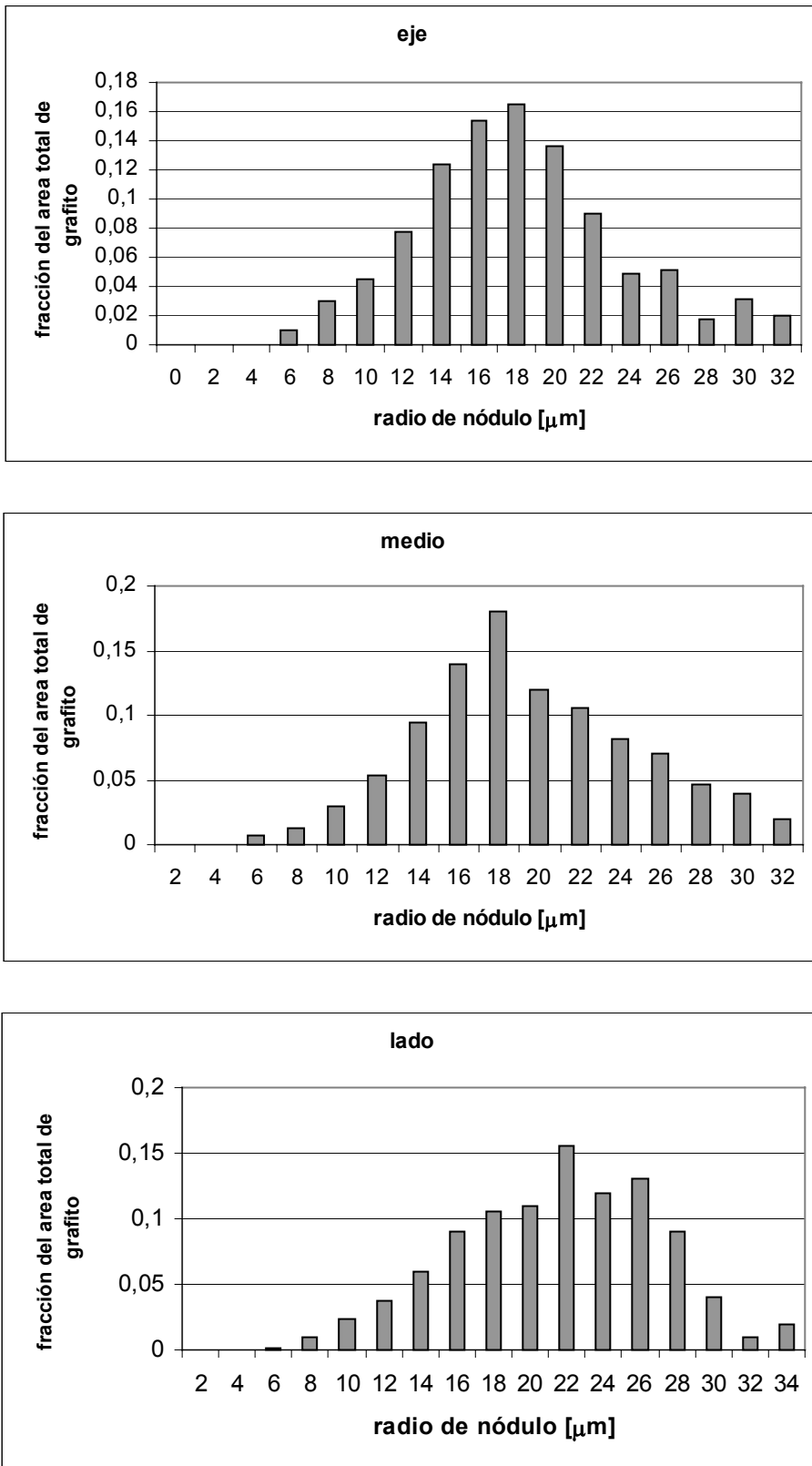


Figura IX-26: Caso II, distribución de área de grafito en función del radio de los nódulos (Experimental).

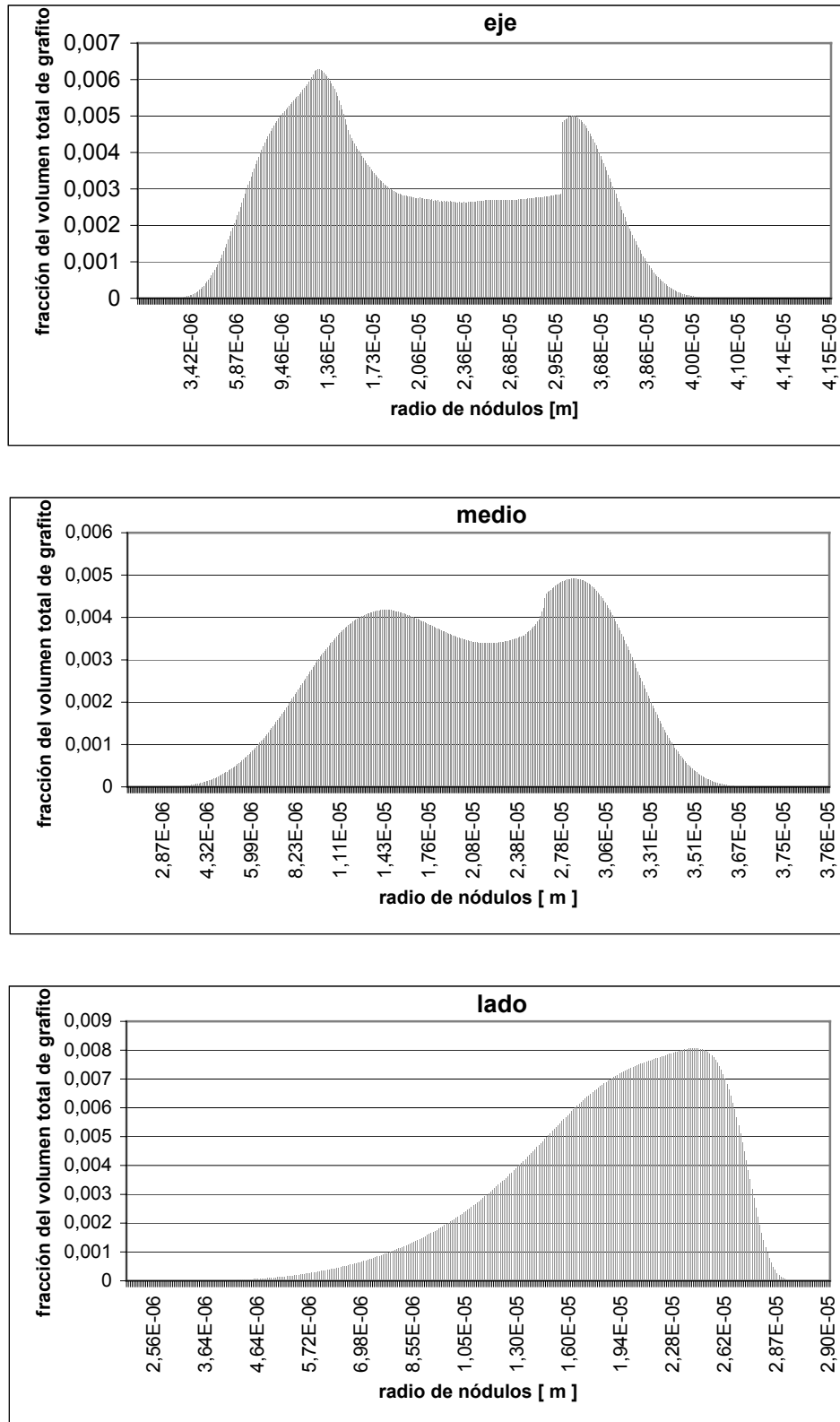


Figura IX-27: Caso II, distribución de volumen de grafito en función del radio de los nódulos (Modelo plurinodular T).

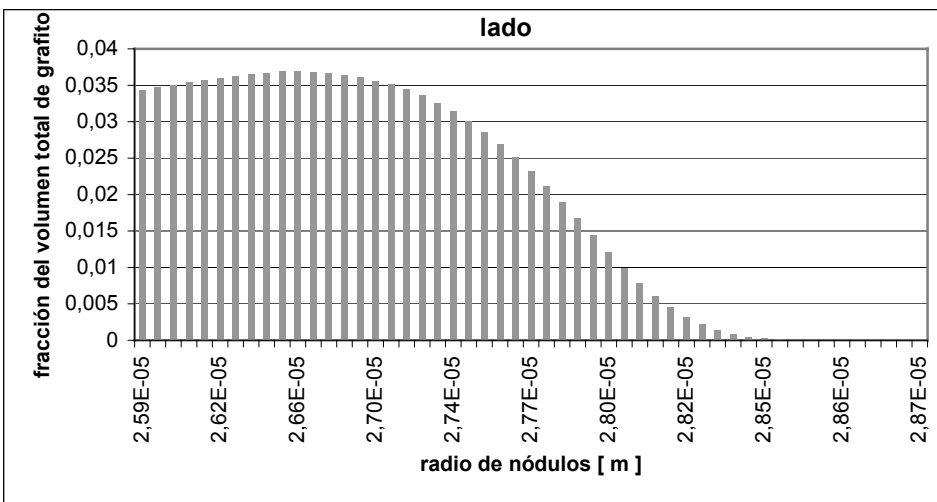
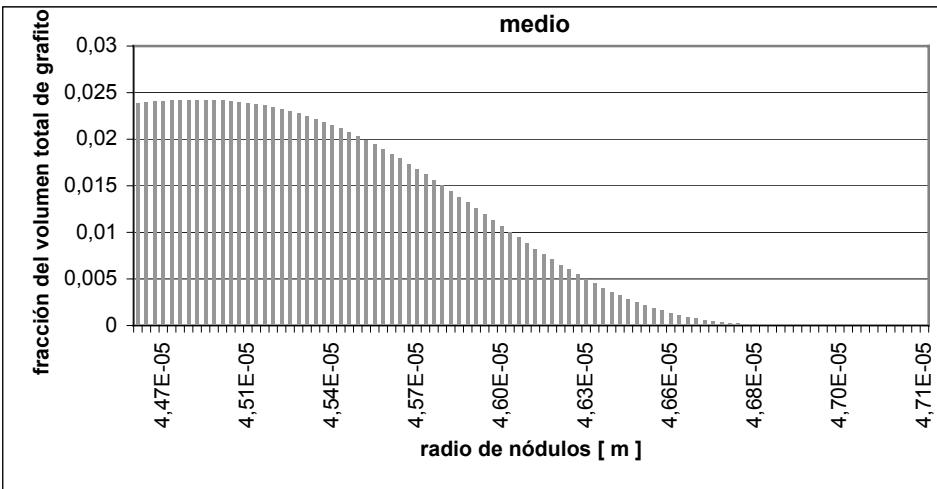
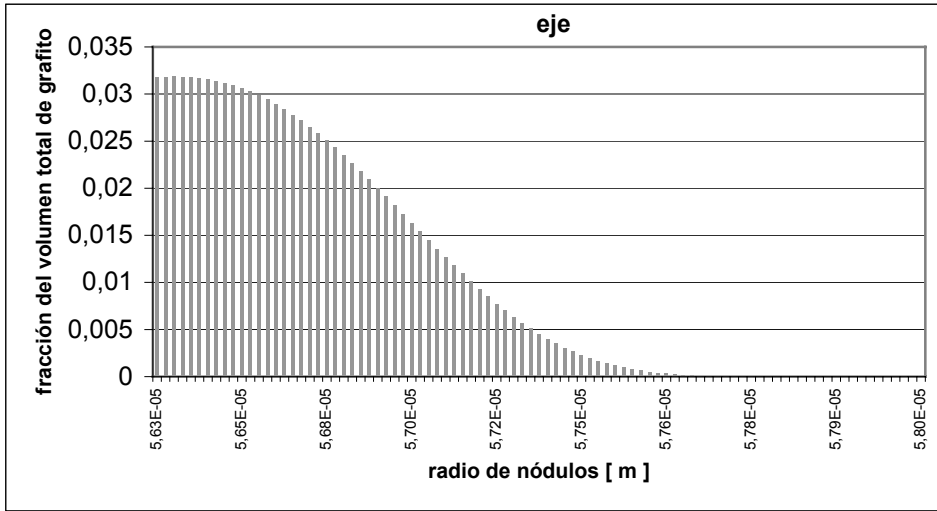


Figura IX-28: Caso II, distribución de volumen de grafito en función del radio de los nódulos (Modelo plurinodular B).

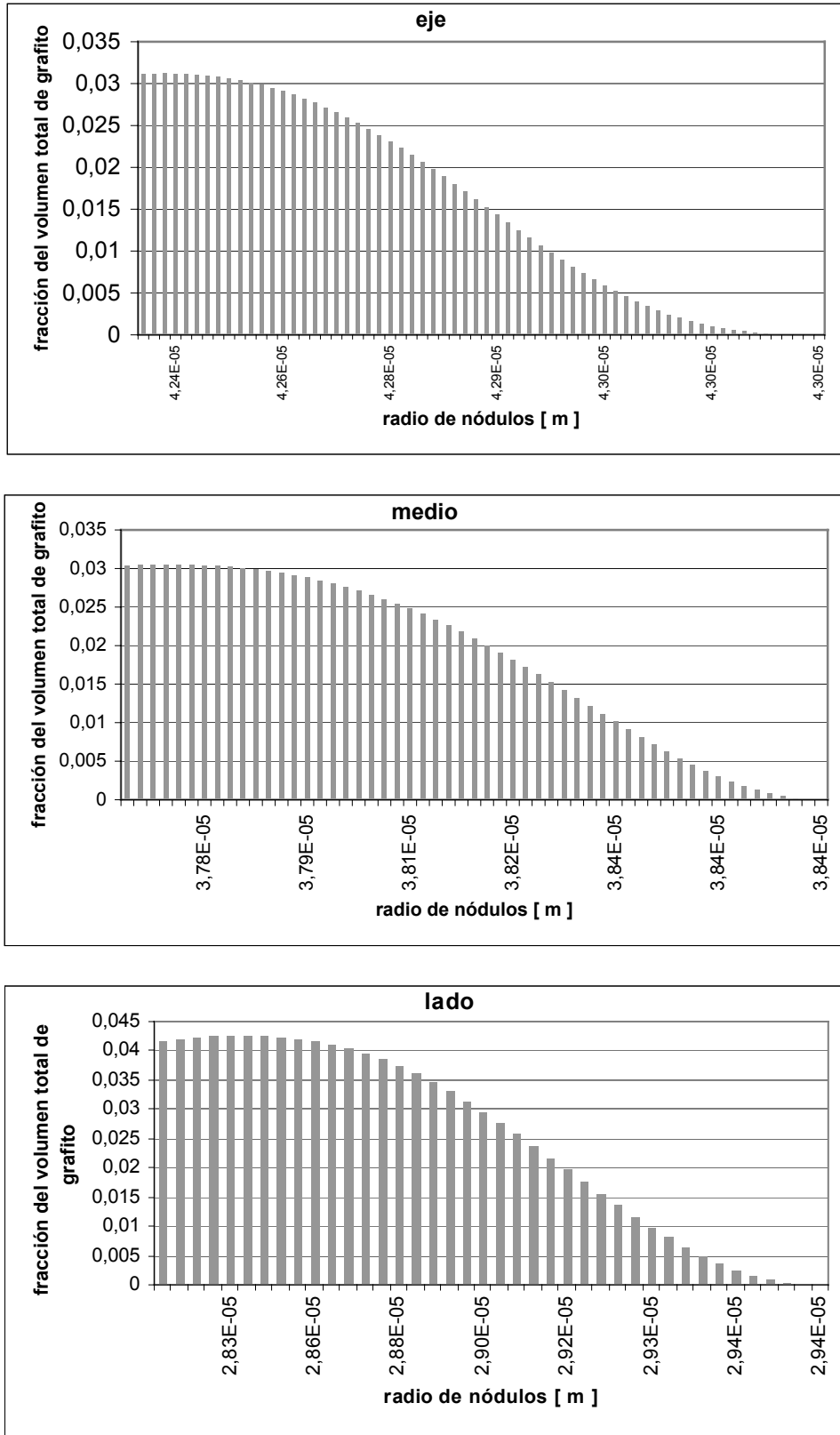


Figura IX-29: Caso II, distribución de volumen de grafito en función del radio de los nódulos (Modelo uninodular S).

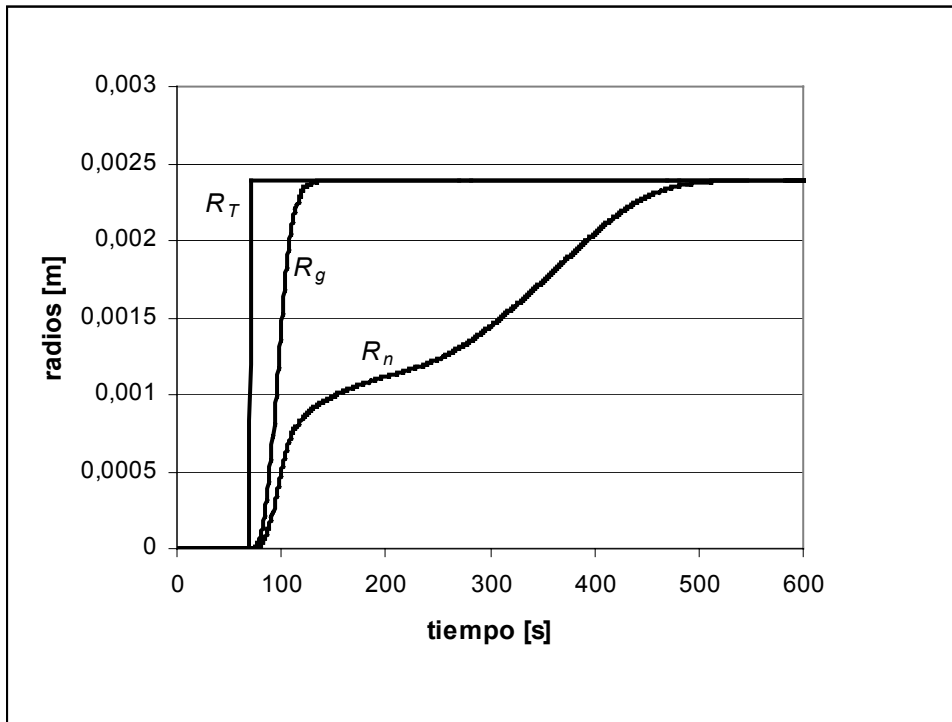


Figura IX-30: Caso II, evolución de los radios de austenita (Modelo plurinodular T).

#### IX.4. MODIFICACIÓN DE LAS CONDICIONES DE NUCLEACIÓN PARA EL MODELO PLURINODULAR B

En base a las comparaciones realizadas entre los resultados obtenidos mediante los cálculos con los diferentes modelos y las curvas empíricas, resulta de interés analizar los cambios que se producen en las respuestas del modelo plurinodular B si se incorpora la misma condición de nucleación que se utiliza en el modelo plurinodular T. Es decir que la nucleación no se interrumpirá definitivamente cuando se produzca la recalescencia sino que continuará cuando la temperatura descienda por debajo de la más baja alcanzada hasta ese momento, siempre que no haya finalizado la solidificación.

Las curvas de enfriamiento obtenidas después del cambio mencionado pueden verse en la Figura IX-31. Se observa un mejor ajuste de las mismas a los resultados experimentales sobre el final de la solidificación. En la Figura IX-32 se observa la evolución de la fracción líquida y puede verse que el tiempo total de solidificación es ahora menor al obtenido mediante los otros modelos. La distribución del volumen de grafito en función del radio presenta ahora una disminución hacia ambos extremos (ver Figura IX-33) y los radios de los nódulos son menores. La densidad de nódulo es ahora de  $7.54E12$  nódulos/m<sup>3</sup>.



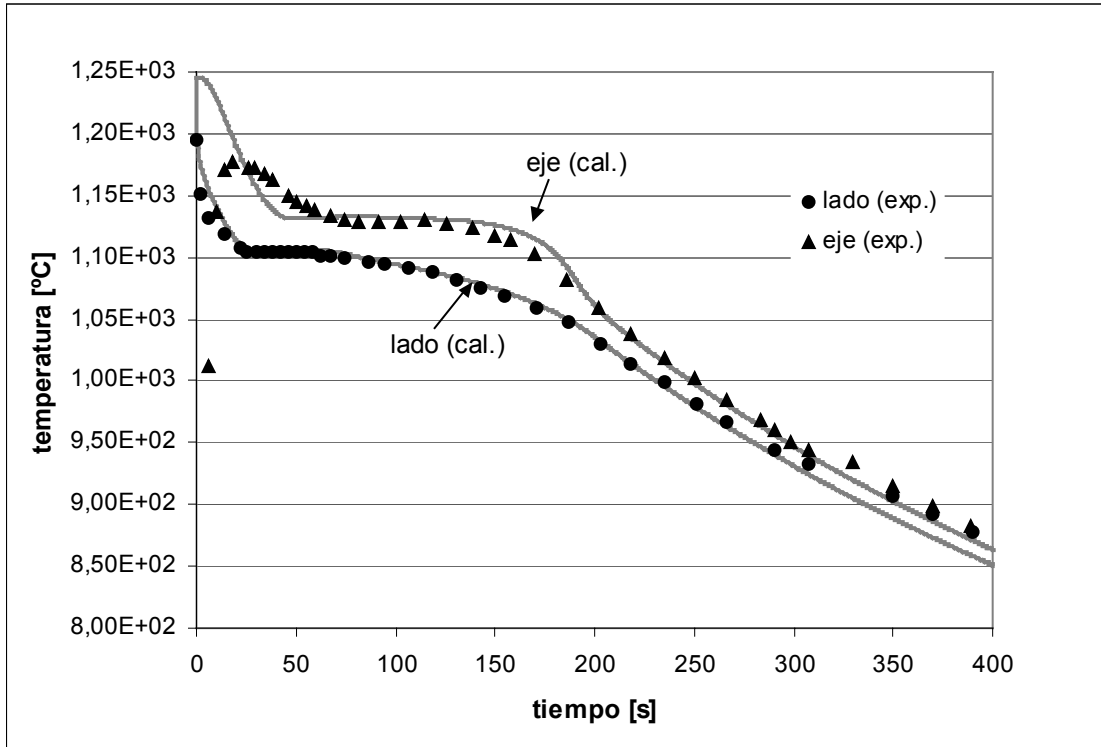


Figura IX-31: Caso I, curvas de enfriamiento experimentales y numéricas (Modelo plurinodular B con nucleación dependiente de la temperatura).

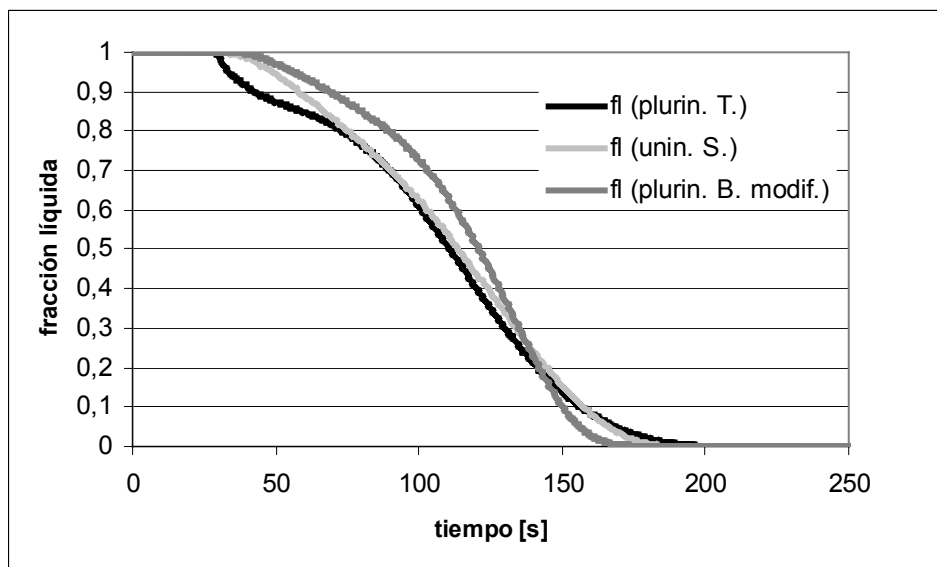


Figura IX-32: Caso I, evolución de la fracción líquida.

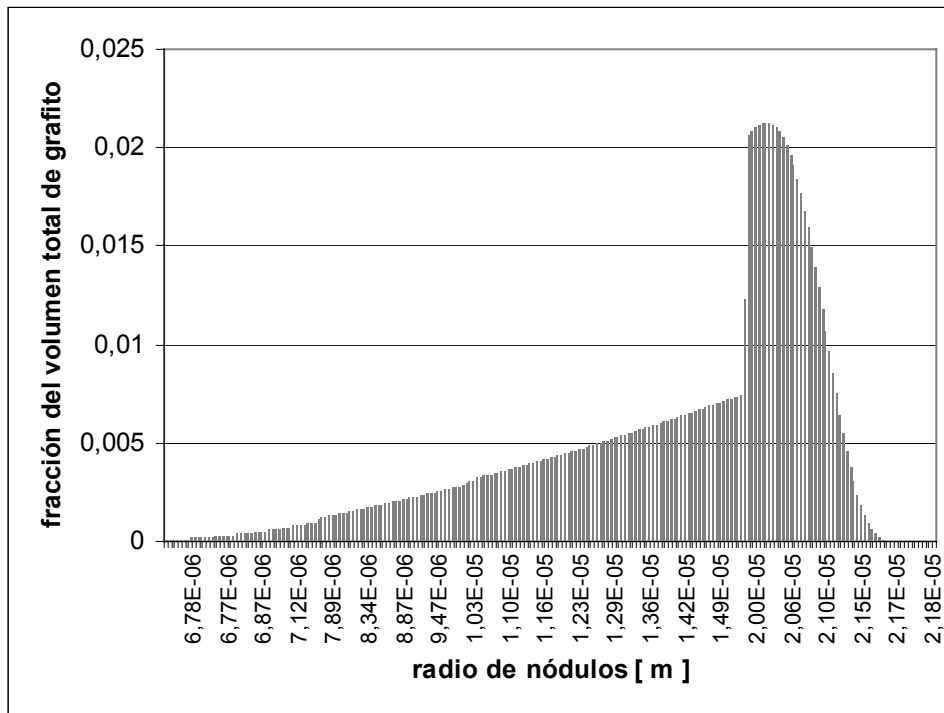


Figura IX-33: Caso I, distribución de volumen de grafito en función del radio de los nódulos. Modelo plurinodular B con nucleación dependiente de la temperatura.

## IX.5. CONCLUSIONES

En este capítulo se realizaron comparaciones de resultados experimentales con los numéricos obtenidos mediante los tres modelos ya mencionados. De dichas comparaciones pueden extraerse las siguientes conclusiones:

- Mediante el modelo plurinodular T se obtiene una mejor aproximación de las curvas de enfriamiento calculadas a las correspondientes experimentales. Esto ocurre tanto al comienzo de la solidificación como al final de la misma. El mejor ajuste logrado al inicio del proceso de cambio de fase se debe a que el modelo T tiene en cuenta la nucleación y el crecimiento de los granos de austenita, lo que ocasiona un aumento en la temperatura y éste produce el acercamiento de las curvas. Por otro lado, la mejor aproximación que se consigue con el modelo T sobre el final del proceso se debe a que la nucleación del grafito puede continuar después de la recalescencia si se cumple que la temperatura sea inferior a la de inicio de la misma.
- El modelo T produce una densidad y un tamaño máximo de nódulos de grafito más cercanos a los medidos experimentalmente que los que se obtienen mediante los cálculos realizados con los otros modelos.

- La distribución del volumen de grafito según el radio de los nódulos obtenida con el modelo T presenta una disminución hacia los radios menores y mayores tal como ocurre en el caso experimental. No sucede lo mismo con las distribuciones obtenidas mediante los modelos S y B en las que se produce un corte abrupto para los tamaños de nódulo menores.
- Al considerar la nucleación y el crecimiento de los granos de austenita, el modelo T permite calcular el tamaño y densidad de los mismos.
- La modificación de las condiciones de nucleación en el modelo B , produce una mejor aproximación de las curvas de enfriamiento calculadas a las experimentales y también mejoran los valores obtenidos para la densidad y tamaño de nódulos. Esto contribuye a reforzar la hipótesis de que la nucleación, bajo determinadas circunstancias, puede producirse aún después de la recalcificación.



## *CAPÍTULO X*

### **CONCLUSIONES Y LINEAS FUTURAS DE INVESTIGACIÓN**

#### **X.1. RESUMEN DE LOS PRICIPALES DESARROLLOS DE ESTA TESIS**

En esta tesis se propuso un nuevo modelo numérico para la solidificación de la fundición nodular de composición eutéctica. Dicho modelo responde a los principales puntos de la teoría plurinodular y es acoplado a la resolución a nivel macroscópico, por el método de los Elementos Finitos, de la ecuación del calor.

Las características más importantes del nuevo modelo son:

- Se tiene en cuenta la nucleación (instantánea) de la austenita y su crecimiento dendrítico lo que permite la determinación del tamaño de grano.
- La nucleación del grafito se simula continua y basada en una ley exponencial y, si bien se detiene durante la recalcencia, se reinicia cuando la temperatura desciende por debajo de la temperatura más baja alcanzada hasta ese momento.
- Los nódulos de grafito crecen en forma esférica por difusión del carbono en el líquido y dejan de crecer cuando son rodeados por austenita.
- Se diferencia el crecimiento de los nódulos que se encuentran en el líquido interdendrítico de los que están en el líquido intergranular.
- Se mantiene la conservación de la masa de soluto.
- Se considera la microsegregación del silicio y su influencia sobre el diagrama de equilibrio (temperaturas y concentraciones de equilibrio).
- Se consideran propiedades del material variables con la temperatura.
- La conductividad depende del estado líquido, sólido o pastoso de la fundición.

Se realizó la validación del modelo propuesto mediante la comparación con resultados experimentales. Los resultados obtenidos con el nuevo modelo se compararon además con los correspondientes a modelos microestructurales de otros autores que también fueron implementados en este trabajo.

Se incursionó en la técnica de AC mediante la cual se trató la solidificación de la fundición dúctil, según la teoría uninodular y de manera desacoplada del nivel macromecánico.

## X.2. CONCLUSIONES

Las principales conclusiones extraídas durante el desarrollo del trabajo pueden sintetizarse en los siguientes puntos:

- El análisis de sensibilidad del modelo a la variación de los parámetros de nucleación y a la variación de la velocidad de enfriamiento, arroja resultados coherentes con lo que se observa en la realidad. Esto es: una mejor inoculación produce mayor cantidad de nódulos de tamaños mas pequeños y una mayor velocidad de enfriamiento también aumenta la densidad de grano y de nódulos y disminuye sus tamaños.
- Las curvas de enfriamiento obtenidas mediante el nuevo modelo se ajustan muy bien a las registradas experimentalmente. Con respecto a modelos plurinodulares que no simulan la nucleación ni el crecimiento dendrítico de la austenita produce una mejor aproximación en el inicio del proceso de solidificación. También logra un mejor ajuste a las curvas experimentales al final del cambio de fase debido a que la nucleación puede ocurrir aún después de la recalcencia.
- La implementación de leyes de nucleación y de crecimiento dendrítico independientes para la austenita, permite predecir el tamaño de grano final. También es posible conocer el tiempo en el cual las puntas de las dendritas principales de un grano llegan a interactuar con las de otros granos, tiempo a partir del cual el aumento de la fracción de austenita se produce por engrosamiento de las ramas dendríticas. Esta información resulta de importancia como punto de partida para una posterior consideración de la transformación eutectoide ya que influye en la distribución de las microsegregaciones.
- La distribución del volumen de grafito según el tamaño de los nódulos presenta una mejor aproximación a los resultados experimentales para velocidades de enfriamiento mayores. Es decir, considerando ambas probetas se obtienen mejores resultados para el caso de la probeta más pequeña y, considerando cada una de las probetas separadamente las mejores aproximaciones a los resultados experimentales se producen en los puntos más superficiales.
- La aproximación a los resultados experimentales de la distribución del volumen de grafito, la densidad y el tamaño máximo de los nódulos mejora cuando se permite la nucleación después de la recalcencia.

## X.3. CONTRIBUCIONES ORIGINALES DE ESTA TESIS

Como ya se mencionó, el modelo microestructural desarrollado en esta tesis para el tratamiento de la solidificación equiaxial eutéctica de la fundición nodular, responde a la teoría plurinodular . Los principales aportes de este trabajo con respecto a otros modelos que simulan la misma teoría pueden resumirse en los siguientes:

- Se considera tanto la nucleación de la austenita como la del grafito.

- Se tiene en cuenta, en el mismo modelo, el crecimiento dendrítico de la austenita y el crecimiento esférico de los nódulos de grafito, manteniendo permanentemente el balance de masa del carbono.
- Se diferencia el crecimiento de los nódulos de grafito que se encuentran en el líquido interdendrítico del que tienen los que están en la zona intergranular.
- La nucleación de los nódulos de grafito puede continuar después de la recalcificación si la temperatura desciende por debajo de la más baja alcanzada hasta ese momento y si no ha finalizado la solidificación.

#### **X.4. LÍNEAS FUTURAS DE INVESTIGACIÓN**

Aún cuando en el nuevo modelo se incorpora la consideración de algunos aspectos de la solidificación de la fundición dúctil cuyo tratamiento no han sido tenido en cuenta o se ha simplificado demasiado en modelos anteriores, son aún muchas las hipótesis simplificadoras que se realizan y cuya eliminación contribuiría a dar nuevos pasos en el camino a conseguir una mejor simulación del proceso. Entre ellos se podrían mencionar:

- Modificar el modelo de crecimiento dendrítico de la austenita de manera de poder considerar una composición no uniforme del líquido interdendrítico. Como puede observarse en los resultados, las dendritas principales alcanzan muy rápidamente el borde de grano de austenita, de manera que el líquido intergranular en el cual se considera una concentración variable del soluto desaparece tempranamente y, a partir de ese momento, el aumento de la fracción austenita se produce en un líquido de composición uniforme, sin tener en cuenta la difusión del carbono y siguiendo prácticamente la ley de Scheil. Existen en la literatura modelos de simulación de crecimiento dendrítico equiaxial en los cuales la superficie que envuelve al líquido interdendrítico no es esférica sino que se ajusta más estrechamente a las ramas principales. Este tipo de modelos podría usarse en reemplazo del adoptado en esta tesis, sin embargo esta incorporación complicaría todas las consideraciones relacionadas con la ubicación de los nódulos de grafito y este sería un complejo problema a resolver.
- Simular una nucleación continua de la austenita lo que permitiría obtener una distribución de tamaño de los granos de austenita en cada elemento de volumen representativo macroscópico (correspondiente a cada punto de Gauss), tal como ocurre para los nódulos de grafito. Hay que tener en cuenta que la nucleación instantánea adoptada en esta tesis permite establecer, al comienzo de la solidificación, los volúmenes microscópicos (cada grano) en los cuales se establecerá la conservación de la masa de soluto, si la nucleación se simulara continua probablemente sería necesario plantear las ecuaciones de balance de masa a nivel del volumen representativo macroscópico y esto complica extremadamente el modelo. La justificación de tal complicación debería analizarse cuidadosamente de manera experimental, utilizando técnicas especiales que permitan observar la microestructura de solidificación y determinar el nivel de variación del tamaño de grano de la austenita.

- Modificar las leyes de nucleación de manera de tener en cuenta otras fuentes de núcleos además de la inoculación. Algunos autores concuerdan en que no sólo los elementos intencionalmente agregados al líquido con el propósito de generar sitios de nucleación son los causantes de nuevos granos, sino que pueden existir otras causas de nucleación heterogénea tales como la fragmentación de las dendritas, que puede producirse por ejemplo mientras se produce la colada o por la convección del líquido o bien la refundición de las bases de algunas ramas dendríticas que producen su desprendimiento. Tener en cuenta otros aspectos además de la inoculación ocasionaría, probablemente, la necesidad de aumentar el número de los parámetros de nucleación cuya determinación se complicaría ya que, en caso de tomar en cuenta las otras posibles causas de generación de sitios de nucleación, podrían ser necesario tener en cuenta otros factores como por ejemplo las características propias de la pieza que se esté colando.
- Incorporar la microsegregación de elementos de aleación. Como ya ha sido mencionado, la microsegregación de los elementos de aleación ocasiona concentraciones de los mismos empobrecidas en ciertos puntos y enriquecidas en otros, según se trate de elementos que segregan hacia el líquido como en el caso del Mn y el Cr o de aquellos con segregación inversa como el Cu. La importancia de tener en cuenta la microsegregación de los elementos de aleación reside principalmente en que el nivel de concentración de los mismos puede favorecer o dificultar la formación de determinadas fases en la transformación eutectoide y, dado que las microsegregaciones difícilmente se modifican después de la solidificación, también pueden tener influencia en tratamientos térmicos posteriores. Por otra parte también existe la posibilidad de la formación de carburos. En el modelo propuesto en esta tesis se tiene en cuenta la microsegregación del silicio mediante la ley de Scheil pero sólo se considera la concentración de dicho elemento en el líquido a los efectos de la determinación de las temperaturas de equilibrio del diagrama. Esta misma ley podría utilizarse para el análisis de la microsegregación de otros elementos, teniendo en cuenta en cada caso el coeficiente de partición correspondiente, almacenando las concentraciones del sólido, aunque, evidentemente, esto demandaría una gran capacidad de máquina.
- Determinar el espaciamiento de las ramas secundarias de austenita que, junto con el tamaño de grano permitan conocer el nivel de distribución de las microsegregaciones. La distribución de la microsegregación se hace más uniforme para niveles de nucleación más elevados pero también cuando la ramificación secundaria y de niveles superiores de las dendritas se hace más intensa. Esto produce una influencia directa sobre las propiedades mecánicas de la pieza y también indirecta a través del condicionamiento que ejerce sobre las transformaciones de fase posteriores. El mecanismo por el cual se produce el espaciado final de las dendritas secundarias es complejo, sobre todo si se tiene en cuenta que sólo algunas de las ramas que se originan sobreviven. Algunos investigadores han propuesto fórmulas para la determinación del espaciado secundario final en función de parámetros como el tiempo de solidificación o la velocidad de crecimiento de las ramificaciones secundarias. Estas



fórmulas podrían aplicarse al final del proceso de solidificación, de manera que los valores de los parámetros que en ellas intervienen puedan determinarse como resultado del análisis de dicho proceso.

- Tomando como base el modelo de solidificación desarrollado, implementar la simulación del segundo cambio de fase y la determinación de las propiedades finales de material. Como ya se dijo las propiedades mecánicas finales del material dependen en gran medida de los porcentajes y características de las fases que se generan en la transformación eutectoide, de ahí la importancia de simular este proceso. Si bien existen numerosos modelos numéricos que tratan dicho fenómeno, resulta de interés lograr el acoplamiento de los mismos al nuevo modelo de manera de aprovechar la nueva información que este brinda, por ejemplo el tamaño de grano de austenita, que puede influir por ejemplo en los sitios de nucleación de las nuevas fases.

Es muy importante que, paralelamente a los cambios y mejoras en la simulación numérica, se produzca el perfeccionamiento de las técnicas experimentales de manera que permitan obtener más y mejor información con la cual comparar los resultados numéricos.



## REFERENCIAS

- [ 1 ] **Aguilar W., Boeri R.** – *Comportamiento a la Segregación de los Elementos de Aleación usados en Fundiciones Esferoidales de Fabricación*, Jornadas SAM – IV Coloquio Latinoamericano de Fractura y Fatiga, Agosto, 2000.
- [ 2 ] *ASM Specialty Handbook: Cast Irons*, ASM International, 1996.
- [ 3 ] **Bentz D.** – *Three-Dimensional Computer Simulation of Portland Cement Hydration and Microstructure Development*, Journal Am. Ceram. Soc., Vol. 80 [1], pp. 3-21, 1997.
- [ 4 ] **Bentz D., Coveney P., Garboczi E., Kleyn M., Stutzman P.** – *Cellular Automaton Simulations of Cement Hydration and Microstructure Development*, Modelling Simul. Mater. Sci. Eng., Vol 2, pp. 783-808, 1994.
- [ 5 ] **Bermont V. , Sikora J.** – *Metallographic Study on the Influence of the Morphology and Distribution of Graphite on the Solid State Transformations of Grey and Ductil Cast Iron*, International Journal of Cast Metals Research, Vol. 11, pp. 51-61, 1998.
- [ 6 ] **Boeri R.** – *The Solidification of Ductile Cast Iron*, Tesis Doctoral, University of British Columbia, 1989.
- [ 7 ] **Boeri R. , Sikora J.** – *Solidification Macrostructure of Spheroidal Graphite Cast Iron* , International Journal of Cast metals Research, Vol. 13, pp. 307-313, 2001.
- [ 8 ] **Borrajo J.** – *Modelado de las Características de los Nódulos de Grafito durante la Solidificación de Fundición Esferoidal de Pequeños Espesores*, Tesis de Master, Universidad Nacional de Mar del Plata, Mar del Plata, 2002.
- [ 9 ] **Borrajo J., Martínez R., Boeri R., Sikora J.** – *Predicción del Conteo Nodular en Fundiciones mediante el Análisis de Curvas de Enfriamiento*, Jornadas SAM 2000 – IV Coloquio Latinoamericano de Fractura y Fatiga, 2000.
- [ 10 ] **Borrajo J., Martínez R., Boeri R., Sikora J.** – *Desarrollo para Predecir Conteo Nodular y Forma del Grafito en Fundición Esferoidal de Pequeño Espesor*, Jornadas SAM – CONAMET – AAS 2001, Misiones, Argentina, 2001.
- [ 11 ] **Calvo Rodes R.** – *Prontuario Metalotécnico. Tomo I: Fundamentos*, INTA, 1963.
- [ 12 ] **Castro M., Alexandre P., Lacaze J., Lesoult G.** – *Microstructures and Solidification Kinetics of Cast Irons: Experimental Study and Theoretical Modelling of Equiaxed Solidification of S. G. And Grey Cast Iron*, Proceedings of the 4th International Symposium on the Metallurgy of Cast Iron. Tokyo, Japón, septiembre 433-440, pp. 15-26, 1989.
- [ 13 ] **Catalina A., Guo X., Stefanescu D., Chuzhoy L., Pershing M.** – *Prediction of Room Temperature Microstructure and Mechanical Properties in Gray Iron Casting*, AFS Transactions, Vol. 108 72, pp. 247-257, 2000.

- [ 14 ] **Celentano D.** – *Un Modelo Termomecánico para Problemas de Solidificación de Metales*, Tesis Doctoral, Escuela Técnica Superior de Ingenieros de Caminos Canales y Puertos, Universidad Politécnica de Cataluña, Barcelona, 1994.
- [15] **Celentano D., Oller S., Oñate E.** – *A Coupled Thermomechanical Model for the Solidification of Cast Metals*, Int. J. Solids Structures, Vol. 33 N° 5, pp. 647-673, 1996.
- [16] **Celentano D., Ansari A., Tartera J.** – *Un Modelo Viscoplastico Aplicado a la Solidificación de la Fundición de Hierro Esferoidal*, Revista Fundidores (España), pp. 27-32, Noviembre 1996.
- [ 17 ] **Celentano D., Pérez E.** – *A Phase-Change Temperature-Based Formulation Including General Latent Heat Effects*, Int. J. Num. Meth. Heat Fluid Flow, Vol. 6 N° 8, pp. 71-79, 1996.
- [ 18 ] **Celentano D., Oñate E., Oller S.** – *A Temperature-based Formulation for Finite Element Analysis of Generalized Phase-change Problems*, International Journal for Numerical Methods in Engineering, Vol 37, pp. 3441-3465, 1994.
- [ 19 ] **Celentano D., Gunasegaram D., Nguyen T.** – *A Thermomechanical Model for the Analysis of Light Alloy Solidification in a Composite Mould*, Int. Journal of Solids and Structures 36, pp. 2341-2378, 1999.
- [ 20 ] **Celentano D., Cruchaga M.** – *A Thermally Coupled Flow Formulation with Microstructural Evolution for Hypoeutectic Cast-Iron Solidification*, Metallurgical and Material Transactions B, Vol. 30B, pp. 731-744, 1999.
- [ 21 ] **Celentano D.** – *A Finite Element Formulation for Phase-Change Problems with Advective Effects*, Communications in Numerical Methods in Engineering, 14, pp. 719-730, 1998.
- [ 22 ] **Chalmers B.** – *Principles of Solidification*, John Wiley & Sons, Inc., 1964.
- [ 23 ] **Chang S., Shanguan D., Stefanescu D. M.** – *Prediction of Microstructural Evolution in SG Cast Iron from Solidification to Room Temperature*, AFS Transactions Vol. 99. pp. 531-541, 1991.
- [ 24 ] **Cruchaga M., Celentano D.** – *A Finite Element Thermally Coupled Flow Formulation for Phase-Change Problems*, International Journal for Numerical Methods in Fluids, 34, pp. 279-305, 1999.
- [ 25 ] **Dardati P., Celentano D., Godoy L., Boeri R.** – *Numerical Simulation of Solidification Processes of Spheroidal-Graphite Cast Iron*, Journal of Computational Methods in Sciences and Engineering, en imprenta.
- [ 26 ] **Dardati P., Celentano D., Godoy L., Boeri R.** – *Simulación Numérica del Proceso de Solidificación de la Fundición Dúctil*, Mecánica Computacional, Vol. XXI, pp. 2855-2874, 2002.
- [ 27 ] **Dardati P., Godoy L., Cervetto G., Paguaga P.** – *Modelación mediante Autómata Celular de la Micromecánica en Solidificación de Fundición de Grafito Esferoidal*. Mecánica Computacional, Vol. XXII, pp. 1319-1333, 2003.

- [ 28 ] **Dardati P., Godoy L., Celentano D., Bertorello H.** – *Modelo para la Simulación Numérica de la Solidificación de la Fundición Dúctil*, Mecánica Computacional, Vol. XXIII, pp. 2653-2677, 2004.
- [ 29 ] **Flemings M. C.** – *Solidification Processing*, Mc Graw-Hill, Inc., 1974.
- [ 30 ] **Fras E.** – *A Computer-aided Simulation of the Kinetics of Solidification of the Eutectic Ductile Cast Iron*, Proceedings of the 3th International Symposium on the Metallurgy of Cast Iron. Estocolmo, Suecia, agosto 29-31, pp. 191-199, 1984.
- [ 31 ] **Fredriksson H., Svensson I.** – *Computer Simulation of the Structure Formed During Solidification of Cast Iron*, Proceedings of the 3th International Symposium on the Metallurgy of Cast Iron. Estocolmo, Suecia, agosto 29-31, pp. 273-284, 1984.
- [ 32 ] **Gandin Ch., Rappaz M., Tintillier R.** – *Three-Dimensional probabilistic Simulation Grain Structures: Application to Superalloy Precision Casting*, Metallurgical Transactions A, vol. 24 A, pp.467-479 , 1993.
- [ 33 ] **Gandin Ch., Rappaz M.** – *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.
- [ 34 ] **Gandin Ch., Rappaz M.** – *A 3D Cellular Automaton for the Prediction of Dendritic Grain Growth*, Acta Mater., vol. 45, N° 5, pp. 2187-2195,1997.
- [ 35 ] **Godoy L.A.** – *Modelos y Enfoques para Problemas con Acoplamiento de Micro y Macro Estructuras*, Mecánica Computacional, Vol. XXII, pp. 1964-1984, 2003.
- [ 36 ] **Guo X., Stefanescu D. , Chuzhoy L., Pershing M., Biltgen G.** – *A Mechanical Properties Model for Ductil Iron*. AFS Transactions., vol. 105, pp. 47-54, 1997.
- [ 37 ] **Guo X., Stefanescu D.** – *Solid Phase Transformation in Ductile Iron – A Benchmark for Computational Simulation*, AFS Transactions., vol. 105, pp. 533-543, 1997.
- [ 38 ] **Heine R. W.** – *The Fe-C-Si Solidification Diagram for Cast Irons*, AFS Transactions, 86-71, pp. 391-402, 1986.
- [ 39 ] **Hummer R.** – *A Study of the Shrinkage and Dilatation During Solidification of Nodular Cast Iron – Its Relation to the Morphology of Crystallisation*, Proceedings of the 3th International Symposium on the Metallurgy of Cast Iron. Estocolmo, Suecia, agosto 29-31, pp. 213-222, 1984.
- [ 40 ] **Jacovkis P.** – *Computadoras, Modelización Matemática y Ciencia Experimental*, Mecánica Computacional, Vol. XXIII, pp.747-758, 2004.
- [ 41 ] **Kurz W., Fisher D.** – *Fundamentals of Solidification*, Trans Tech Publications 1989.
- [ 42 ] **Labrecque C., Gagné M.** – *Review Ductil Iron: Fifty Years of Continuous Development*, Canadian Metallurgical Quarterly, Vol. 37 N° 5, pp. 343-378, 1998.
- [ 43 ] **Lesoult G., Castro M., Lacaze J.** – *Solidification of Spheroidal Graphite Cast Irons: Part I Phisycal Modelling*, Acta Mater. 46, pp. 983, 1998.

- [ 44 ] **Lesoult G., Castro M., Lacaze J.** – *Solidification of Spheroidal Graphite Cast Irons: Part II Numerical Simulation*, Acta Mater. 46, pp. 997, 1998.
- [ 45 ] **Liu B., Zhao H., Liu W., Wang D.** – *Study of Microstructure Simulation of Spheroidal Graphite Cast Iron*, Int. J. Cast Metals Res. Vol 11, N° 5, pp. 471-476, 1999. Proceedings of the 6th Int. Symposium on the Science and Processing of Cast Iron, Birmingham, Alabama, USA, octubre 1-3, 1998.
- [ 46 ] **Liu J., Elliott R.** – *Numerical Modelling of the Solidification of Ductil Iron*, Journal of Crystal Growth 191 , pp. 261-267, 1998.
- [ 47 ] **Matic P., Geltmacher A.** – *A cellular automaton-based technique for modeling mososcale damage evolution*, Computational Material Science, vol. 20, pp. 120-141, 2001.
- [ 48 ] **Nastac L., Stefanescu D.** – *Simulation of Microstructure Evolution During Solidification of Inconel 718*, AFS Transactions, vol. 104, pp.96-193, 1996.
- [ 49 ] **Nastac L., Stefanescu D.** – *Macrotransport- Solidification Kinetics Modeling of Equiaxed Dendrite Growth: Part I. Model Development and Discussion*, Metallurgical and Material Transactions A, vol. 27 A, pp. 4061-4074, 1996.
- [ 50 ] **Nastac L., Stefanescu D.** – *Modeling of Microsegregation in SG Cast Iron*, AFS Transactions, vol. 101, pp.933-938, 1993.
- [ 51 ] **Noguchi T., Nagaoka K.** – *Three Dimensional Distribution of Graphite Nodules in Spheroidal Graphite Cast Iron*, Transactions of the AFS, 85-13, pp. 115-122. 1985.
- [ 52 ] **Onsoien M., Grong O., Gundersen O., Skaland T.** – *A process Model for the Microstructure Evolution in Ductile Cast Iron: Part I. The Model*, Metallurgical and Material Transaction A, Vol. 30 A, pp. 1053-1068, 1999.
- [ 53 ] **Onsoien M., Grong O., Gundersen O., Skaland T.** – *A process Model for the Microstructure Evolution in Ductile Cast Iron: Part II. Applications of the Model*, Metallurgical and Material Transaction A, Vol. 30 A, pp. 1069-1079, 1999.
- [ 54 ] **Pang H., Stefanescu D.** – *Stochastic modeling of dendritic and eutectic grain structure evolution during solidification*, Solidification Science and Processing, pp. 149-156, 1996.
- [ 55 ] **Rappaz M.** – *Modelling of Microstructure formation in Solidification Processes*, International Materials Reviews, Vol. 34 N° 3, pp. 93-123, 1989.
- [ 56 ] **Rappaz M., Gandin Ch.** – *Probabilistic modelling of microstructure formation in solidification processes*, Acta Metall. Mater. Vol. 41 ( 2), pp. 345-360, 1993.
- [ 57 ] **Rappaz M., Gandin Ch., Desbiolles J., Thévoz PH.** – *Prediction of Grain Structures in Varios Solidification Processes*, Metallurgical and Materials Transactions A, vol. 27 A, pp.695-705 , 1996.
- [ 58 ] **Rappaz M., Thévoz PH.** – *Solute Diffusion Model for Equiaxed Dendritic Growth*, Acta Metall., vol. 35, N° 7, pp.1487-1497,1987.
- [ 59 ] **Rappaz M., Thévoz PH.** – *Solute Diffusion Model for Equiaxed Dendritic Growth:Analitical Solution*, Acta Metall., vol. 35, N° 12, pp.2929-2933, 1987.

- [ 60 ] **Reed Hill R.** – *Principios de Metalúrgica Física*, Compañía Continental S.A., 1967.
- [ 61 ] **Rickert A., Engler S.** – *Solidification Morphology of Cast Irons*, Proceedings of the Third International Symposium on the Physical Metallurgy of Cast Iron. Estocolmo, Suecia, agosto 29-31, pp. 165-174, 1984.
- [ 62 ] **Rivera G.** – *Estructura de Solidificación de Fundiciones de Hierro con Grafito Esferoidal*, Tesis Doctoral, Universidad Nacional de Mar del Plata, 2000.
- [ 63 ] **Rivera G., Boeri R., Sikora J.** – *Counting Eutectic Grains in SG Cast Iron*, Advanced Materials Research Vol 4, pp.169-174, 1997.
- [ 64 ] **Rivera G., Boeri R., Sikora J.** – *Influence of the Solidification Microstructure on the Mechanical Properties of Ductile Iron*, Int. J. Cast Metals Res. Vol 11, Nº 5, pp. 267-272, 1999. Proceedings of the 6<sup>th</sup> Int. Symposium on the Science and Processing of Cast Iron Birmingham, Alabama, USA, octubre 1-3, 1998.
- [ 65 ] **Rivera G., Boeri R., Sikora J.** – *Revealing the Solidification Structure of Nodular Iron*, Cast Metals, vol. 8 (1), pp. 1-5, 1995.
- [ 66 ] **Rivera G., Boeri R., Sikora J.** – *Influencia de la Inoculación sobre el Refinamiento de la Estructura de Solidificación y sobre las propiedades Mecánicas de Fundiciones Esferoidales Eutécticas*, Jornadas SAM – IV Coloquio Latinoamericano de Fractura y Fatiga, Agosto, 2000.
- [ 67 ] **Rivera G., Boeri R., Sikora J.** – *Influencia del Conteo Nodular sobre el Refinamiento de la macro y Microestructura de solidificación de Fundiciones Esferoidales Eutécticas*, Jornadas SAM – CONAMET –AAS 2001, 2001.
- [ 68 ] **Rojas M., Martínez R., Boeri R., Sikora J.** – *Análisis de la Formación de Microestructura en Fundiciones Esferoidales Mediante Técnicas Computacionales*, Jornadas SAM – IV Coloquio Latinoamericano de Fractura y Fatiga, Agosto, 2000.
- [ 69 ] **Sikora J., Boeri R., Rivera G.** – *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, pp. 28-31, 2001.
- [ 70 ] **Sikora J., Rivera G., Biloni H.** – *Metallographic Study of the Eutectic Solidification of Gray, Vermicular and Nodular Cast Iron*, Proceedings of F. Weimberg International Symposium on Solidification Processing, Pergamon Press, pp. 280-288, 1990.
- [ 71 ] **Stefanescu D.** – *Methodologies for modeling of solidification microstructure and their capabilities*, ISIJ Int., vol. 35(6), pp. 637-650, 1995.
- [ 72 ] **Stefanescu D., Bandyopadhyay D.** – *On the Solidification Kinetics of Spheroidal Graphite Cast Iron*, Proceedings of the Fourth International Symposium on the Physical Metallurgy of Cast Iron. Tokyo, Japan, pp. 15-26, 1989.
- [ 73 ] **Stefanescu D., Kanetkar Ch.** – *Computer Modeling of the Solidification of Eutectic Alloys: the Case of Cast Iron*, Computer Simulation of Microstructural Evolution, David Srolovitz, pp. 171-188, 1985.

- [ 74 ] **Su K., Ohnaka I., Yamauchi I., Fukusako T.** – *Computer Simulation of Solidification of Nodular Cast Iron*, Proceedings of the 3th International Symposium on the Metallurgy of Cast Iron. Estocolmo, Suecia, agosto 29-31, pp. 181-189, 1984.
- [ 75 ] **Thévoz Ph., Desbiolles J., Rappaz M.** – *Modeling of Equiaxed Microstructure Formation in Casting*, Metallurgical Transactions A, vol. 20 A, pp.311-322, 1989.
- [ 76 ] **Van de Velde C.** – *A New Approach to the Solidification of Cast Iron*, <http://members.tripod.lycos.nl/cvdv>
- [ 77 ] **Verhoeven J. D.** – *Fundamentals of Physical Metallurgy*, John Wiley & Sons Cop., 1975.
- [ 78 ] **Wenzhen L., Baicheng L.** – *Microstructure Simulation and Property Prediction of Spheroidal Graphite Iron Casting*, 62<sup>nd</sup> World Foundry Congress, Philadelphia, EE.UU., 1996.
- [ 79 ] **Wetterfall S., Fredriksson H., Hillert M.** – *Solidification Process of Nodular Iron*, Journal Iron Steel Institute, Vol. 210 part I, pp. 323-333, 1972.
- [ 80 ] **Wolfram, S.** – *Theory and Applications of Cellular Automata*, World Scientific, Singapore, 1986.
- [ 81 ] **Wolfram, S.** – *Cellular Automata and Complexity*, Addison-Wesley, Menlo Park, CA, 1994.
- [ 82 ] **Zhao H., Liu B.** – *Modeling of Stable and Metastable Eutectic Transformation of Spheroidal Graphite Iron Casting*, ISI J. International, Vol 41, N° 9, pp.986-991, 2001.
- [ 83 ] **Zhang Y., Subramanian S., Purdy G.** – *Graphite Growth in S.G. Cast Irons: Simulación vs. Experiment*, Proceedings of the 5th International Symposium on the Metallurgy of Cast Iron. Nancy, France, octubre 3-5, pp. 461-468, 1994.
- [ 84 ] **Zhu P., Smith R.** – *Thermal Analysis of Nodular Graphite Cast Iron*, AFS Transactions, Vol. 103, pp. 601-609, 1995.



## APÉNDICE I

### CRECIMIENTO DE $R_n$

#### AP-I.1. INTRODUCCIÓN

La Figura AP- I.1 (a) muestra un grano equiaxial dendrítico, que podemos suponer de austenita, en proceso de solidificación. Se señalan el radio total final del grano  $R_T$ , y el radio  $R_g$  que corresponde a una superficie esférica determinada por las puntas de las dendritas principales y que irá creciendo durante la solidificación. En la Figura AP- I.1 (b) pueden distinguirse tres zonas, determinadas a los fines de realizar una descripción simplificada del perfil de concentración del soluto. La *zona 1* muestra la evolución del contenido de soluto en el sólido, en la *zona 2* se aprecia la distribución, que se supone uniforme, del carbono en el líquido interdendrítico y en la *zona 3* puede verse el perfil de concentración de soluto de la zona intergranular.

Dado que se considera que no hay flujo de soluto a través del contorno esférico de radio  $R_T$ , entonces en cada grano de austenita se conserva, durante su crecimiento, la masa de carbono. Por lo tanto la derivada con respecto al tiempo de la cantidad de carbono de un grano es igual a 0 en cualquier instante. En este Apéndice se analiza el balance de masa de soluto en un grano que está solidificando de manera equiaxial dendrítica con el fin de determinar el valor del radio  $R_n$  en el tiempo  $t+\Delta t$  cuando son conocidas las variables del problema en el tiempo  $t$ .

El análisis se presenta primero sin tener en cuenta la presencia de nódulos de grafito, como si se tratara de un grano dendrítico equiaxial de austenita primaria. Para dicho caso se presentan dos formas de desarrollo, una diferencial y otra incremental, sección AP-I.2. a y b respectivamente. En la sección AP-I.3. se obtiene una expresión de  $R_n$  en base a un desarrollo incremental pero teniendo en cuenta la presencia de los nódulos de grafito. Se comprueba que esta consideración no introduce cambios en la expresión obtenida sin considerar los nódulos. Por último, en la sección AP-I.4. se obtiene la concentración promedio  $C_{pro}$  después del crecimiento de la austenita.

#### AP-I.2. AUSTENITA PRIMARIA

##### a) Desarrollo diferencial

El balance de masa de soluto exige que se cumpla

$$\frac{\partial}{\partial t} \int_0^{R_T} C_{(r,t)} \rho_\gamma 4\pi r^2 dr = 0 \quad (\text{AP- I.1})$$

$C$  es la concentración de carbono de la aleación expresada en [peso carbono / peso aleación].

Dividiendo convenientemente la integral única de la expresión (AP- I.1) se obtiene

$$\frac{\partial}{\partial t} \left[ \int_0^{R_n(t)} C^{z1} \rho_\gamma 4\pi r^2 dr + \int_{R_n(t)}^{R_g(t)} C^{z2} \rho_\gamma 4\pi r^2 dr + \int_{R_g(t)}^{R_T} C^{z3} \rho_\gamma 4\pi r^2 dr \right] = 0 \quad (\text{AP- I.2})$$

En el intervalo  $[0, R_n]$  la concentración de soluto  $C^{z1}$  se considera independiente del tiempo ya que se supone que no existe difusión de carbono en el sólido. En el intervalo  $[R_n, R_g]$ , se supone que la concentración  $C^{z2}$ , que corresponde al líquido interdendrítico, es uniforme, por lo que no varía con el radio. En la zona 3,  $[R_g, R_T]$ , la concentración de soluto  $C^{z3}$  depende del radio y del tiempo. En las integrales (AP- I.2) los límites también dependen del tiempo.

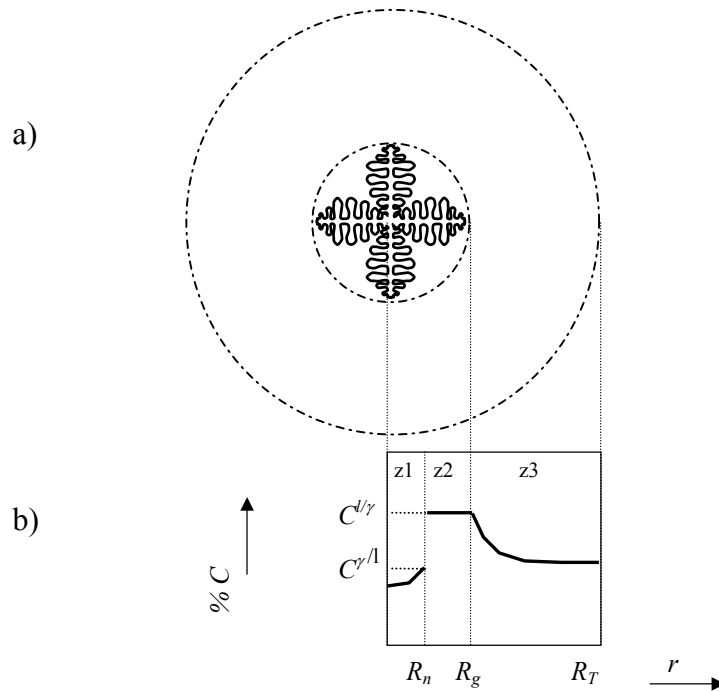


Figura AP- I.1

Desarrollando cada uno de los términos del primer miembro de la expresión (AP- I.2) se obtiene:

- para el primer término (se omite el superíndice z1)

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t} \int_0^{R_{n(t)}} C_{(r)} \rho_\gamma 4\pi r^2 dr &= \lim_{\varepsilon \rightarrow 0} \frac{1}{\varepsilon} \left[ \int_0^{R_{n(t+\varepsilon)}} C_{(r)} \rho_\gamma 4\pi r^2 dr - \int_0^{R_{n(t)}} C_{(r)} \rho_\gamma 4\pi r^2 dr \right] \\ &= \lim_{\varepsilon \rightarrow 0} \frac{1}{\varepsilon} \left[ \int_0^{R_{n(t)}} C_{(r)} \rho_\gamma 4\pi r^2 dr + \int_{R_{n(t)}}^{R_{n(t+\varepsilon)}} C_{(r)} \rho_\gamma 4\pi r^2 dr - \int_0^{R_{n(t)}} C_{(r)} \rho_\gamma 4\pi r^2 dr \right] \\ &= \lim_{\varepsilon \rightarrow 0} \frac{1}{\varepsilon} \left[ \int_{R_{n(t)}}^{R_{n(t+\varepsilon)}} C_{(r)} \rho_\gamma 4\pi r^2 dr \right] \end{aligned}$$

Considerando  $C_{(r)} = C_{(R_{n(t)})}$  y constante en  $[R_{n(t)}, R_{n(t+\varepsilon)}]$  y despreciando diferenciales de orden superior

$$\begin{aligned} \lim_{\varepsilon \rightarrow 0} \frac{1}{\varepsilon} \left[ \int_{R_{n(t)}}^{R_{n(t+\varepsilon)}} C_{(r)} \rho_\gamma 4\pi r^2 dr \right] &= \lim_{\varepsilon \rightarrow 0} \frac{1}{\varepsilon} \left[ C_{(R_{n(t)})} \rho_\gamma \frac{4}{3} \pi (R_{n(t+\varepsilon)}^3 - R_{n(t)}^3) \right] \\ &= \lim_{\varepsilon \rightarrow 0} \frac{1}{\varepsilon} \left[ C_{(R_{n(t)})} \rho_\gamma \frac{4}{3} \pi \left( \left( R_{n(t)} + \frac{dR_{n(t)}}{dt} \varepsilon + \varphi(\varepsilon^2) \right)^3 - R_{n(t)}^3 \right) \right] \\ &= C_{(R_{n(t)})} \rho_\gamma 4\pi R_{n(t)}^2 \frac{dR_{n(t)}}{dt} \end{aligned}$$

Teniendo en cuenta la notación de la Figura AP- I.1 (b) se puede expresar en forma más simple como

$$\frac{\partial}{\partial t} \left[ \int_0^{R_n} C_{(r)} \rho_\gamma 4\pi r^2 dr \right] = C^{\gamma/l} \rho_\gamma 4\pi R_n^2 \frac{dR_n}{dt} \quad (\text{AP- I.3})$$

- para el segundo término

$$\frac{\partial}{\partial t} \left[ \int_{R_{n(t)}}^{R_{g(t)}} C_{(t)} \rho_\gamma 4\pi r^2 dr \right] = \lim_{\varepsilon \rightarrow 0} \frac{1}{\varepsilon} \left[ \int_{R_{n(t+\varepsilon)}}^{R_{g(t+\varepsilon)}} C_{(t+\varepsilon)} \rho_\gamma 4\pi r^2 dr - \int_{R_{n(t)}}^{R_{g(t)}} C_{(t)} \rho_\gamma 4\pi r^2 dr \right]$$

Reacomodando límites

$$\begin{aligned} &= \lim_{\varepsilon \rightarrow 0} \frac{1}{\varepsilon} \left[ \int_{R_{n(t)}}^{R_{g(t)}} C_{(t+\varepsilon)} \rho_\gamma 4\pi r^2 dr - \int_{R_{n(t)}}^{R_{n(t+\varepsilon)}} C_{(t+\varepsilon)} \rho_\gamma 4\pi r^2 dr + \right. \\ &\quad \left. + \int_{R_{g(t)}}^{R_{g(t+\varepsilon)}} C_{(t+\varepsilon)} \rho_\gamma 4\pi r^2 dr - \int_{R_{n(t)}}^{R_{g(t)}} C_{(t)} \rho_\gamma 4\pi r^2 dr \right] \end{aligned}$$

Desarrollando  $C_{(t+\varepsilon)}$

$$\begin{aligned}
 &= \lim_{\varepsilon \rightarrow 0} \frac{1}{\varepsilon} \left[ \int_{R_{n(t)}}^{R_{g(t)}} \left( C_{(t)} + \frac{dC_{(t)}}{dt} \varepsilon + \varphi(\varepsilon^2) \right) \rho_{\gamma} 4\pi r^2 dr - \right. \\
 &\quad \left. - \int_{R_{n(t)}}^{R_{n(t+\varepsilon)}} \left( C_{(t)} + \frac{dC_{(t)}}{dt} \varepsilon + \varphi(\varepsilon^2) \right) \rho_{\gamma} 4\pi r^2 dr + \right. \\
 &\quad \left. + \int_{R_{g(t)}}^{R_{g(t+\varepsilon)}} \left( C_{(t)} + \frac{dC_{(t)}}{dt} \varepsilon + \varphi(\varepsilon^2) \right) \rho_{\gamma} 4\pi r^2 dr - \int_{R_{n(t)}}^{R_{g(t)}} C_{(t)} \rho_{\gamma} 4\pi r^2 dr \right]
 \end{aligned}$$

Simplificando términos

$$\begin{aligned}
 &= \lim_{\varepsilon \rightarrow 0} \frac{1}{\varepsilon} \left[ \int_{R_{n(t)}}^{R_{g(t)}} \left( \frac{dC_{(t)}}{dt} \varepsilon + \varphi(\varepsilon^2) \right) \rho_{\gamma} 4\pi r^2 dr - \right. \\
 &\quad \left. - \int_{R_{n(t)}}^{R_{n(t+\varepsilon)}} \left( C_{(t)} + \frac{dC_{(t)}}{dt} \varepsilon + \varphi(\varepsilon^2) \right) \rho_{\gamma} 4\pi r^2 dr + \right. \\
 &\quad \left. + \int_{R_{g(t)}}^{R_{g(t+\varepsilon)}} \left( C_{(t)} + \frac{dC_{(t)}}{dt} \varepsilon + \varphi(\varepsilon^2) \right) \rho_{\gamma} 4\pi r^2 dr \right]
 \end{aligned}$$

Integrando

$$\begin{aligned}
 &= \lim_{\varepsilon \rightarrow 0} \frac{1}{\varepsilon} \left[ \left( \frac{dC_{(t)}}{dt} \varepsilon + \varphi(\varepsilon^2) \right) \rho_{\gamma} \frac{4}{3} \pi \left( R_{g(t)}^3 - R_{n(t)}^3 \right) - \right. \\
 &\quad \left. - \left( C_{(t)} + \frac{dC_{(t)}}{dt} \varepsilon + \varphi(\varepsilon^2) \right) \rho_{\gamma} \frac{4}{3} \pi \left( R_{n(t+\varepsilon)}^3 - R_{n(t)}^3 \right) + \right. \\
 &\quad \left. + \left( C_{(t)} + \frac{dC_{(t)}}{dt} \varepsilon + \varphi(\varepsilon^2) \right) \rho_{\gamma} \frac{4}{3} \pi \left( R_{g(t+\varepsilon)}^3 - R_{g(t)}^3 \right) \right]
 \end{aligned}$$

Desarrollando  $R_{n(t+\varepsilon)}$  y  $R_{g(t+\varepsilon)}$

$$\begin{aligned}
 &= \lim_{\varepsilon \rightarrow 0} \frac{1}{\varepsilon} \left[ \left( \frac{dC_{(t)}}{dt} \varepsilon + \varphi(\varepsilon^2) \right) \rho_\gamma \frac{4}{3} \pi (R_{g(t)}^3 - R_{n(t)}^3) - \right. \\
 &\quad \left. - \left( C_{(t)} + \frac{dC_{(t)}}{dt} \varepsilon + \varphi(\varepsilon^2) \right) \rho_\gamma \frac{4}{3} \pi \left( \left( R_{n(t)} + \frac{dR_{n(t)}}{dt} \varepsilon + \varphi_1(\varepsilon^2) \right)^3 - R_{n(t)}^3 \right) + \right. \\
 &\quad \left. + \left( C_{(t)} + \frac{dC_{(t)}}{dt} \varepsilon + \varphi(\varepsilon^2) \right) \rho_\gamma \frac{4}{3} \pi \left( \left( R_{g(t)} + \frac{dR_{g(t)}}{dt} \varepsilon + \varphi_2(\varepsilon^2) \right)^3 - R_{g(t)}^3 \right) \right]
 \end{aligned}$$

Desarrollando los cubos y despreciando los términos con diferenciales de orden superior

$$\begin{aligned}
 &= \lim_{\varepsilon \rightarrow 0} \frac{1}{\varepsilon} \left[ \left( \frac{dC_{(t)}}{dt} \varepsilon + \varphi(\varepsilon^2) \right) \rho_\gamma \frac{4}{3} \pi (R_{g(t)}^3 - R_{n(t)}^3) - \right. \\
 &\quad \left. - \left( C_{(t)} + \frac{dC_{(t)}}{dt} \varepsilon + \varphi(\varepsilon^2) \right) \rho_\gamma 4\pi R_{n(t)}^2 \frac{dR_{n(t)}}{dt} \varepsilon + \right. \\
 &\quad \left. + \left( C_{(t)} + \frac{dC_{(t)}}{dt} \varepsilon + \varphi(\varepsilon^2) \right) \rho_\gamma 4\pi R_{g(t)}^2 \frac{dR_{g(t)}}{dt} \varepsilon \right]
 \end{aligned}$$

Dividiendo por  $\varepsilon$

$$\begin{aligned}
 &= \lim_{\varepsilon \rightarrow 0} \left[ \left( \frac{dC_{(t)}}{dt} + \varphi(\varepsilon) \right) \rho_\gamma \frac{4}{3} \pi (R_{g(t)}^3 - R_{n(t)}^3) - \right. \\
 &\quad \left. - \left( C_{(t)} + \frac{dC_{(t)}}{dt} \varepsilon + \varphi(\varepsilon^2) \right) \rho_\gamma 4\pi R_{n(t)}^2 \frac{dR_{n(t)}}{dt} + \right. \\
 &\quad \left. + \left( C_{(t)} + \frac{dC_{(t)}}{dt} \varepsilon + \varphi(\varepsilon^2) \right) \rho_\gamma 4\pi R_{g(t)}^2 \frac{dR_{g(t)}}{dt} \right]
 \end{aligned}$$

Aplicando límite

$$= \frac{dC_{(t)}}{dt} \rho_\gamma \frac{4}{3} \pi (R_{g(t)}^3 - R_{n(t)}^3) - C_{(t)} \rho_\gamma 4\pi R_{n(t)}^2 \frac{dR_{n(t)}}{dt} + C_{(t)} \rho_\gamma 4\pi R_{g(t)}^2 \frac{dR_{g(t)}}{dt}$$

Teniendo en cuenta la notación de la Figura AP- I.1 es posible expresar

$$\frac{\partial}{\partial t} \left[ \int_{R_n}^{R_g} C_{(t)} \rho_\gamma 4\pi r^2 dr \right] = \frac{dC^{l/\gamma}}{dt} \rho_\gamma \frac{4}{3} \pi (R_g^3 - R_n^3) - C^{l/\gamma} 4\pi R_n^2 \frac{dR_n}{dt} + C^{l/\gamma} 4\pi R_g^2 \frac{dR_g}{dt} \quad (\text{AP- I.4})$$

- para el tercer término del primer miembro de la ecuación (AP- I.2)

$$\frac{\partial}{\partial t} \left[ \int_{R_{g(t)}}^{R_T} C_{(r,t)} \rho_\gamma 4\pi r^2 dr \right] = \lim_{\varepsilon \rightarrow 0} \frac{1}{\varepsilon} \left[ \int_{R_{g(t+\varepsilon)}}^{R_T} C_{(r,t+\varepsilon)} \rho_\gamma 4\pi r^2 dr - \int_{R_{g(t)}}^{R_T} C_{(r,t)} \rho_\gamma 4\pi r^2 dr \right]$$

Reacomodando los límites de las integrales

$$= \lim_{\varepsilon \rightarrow 0} \frac{1}{\varepsilon} \left[ \int_{R_{g(t)}}^{R_T} C_{(r,t+\varepsilon)} \rho_\gamma 4\pi r^2 dr - \int_{R_{g(t+\varepsilon)}}^{R_{g(t+\varepsilon)}} C_{(r,t+\varepsilon)} \rho_\gamma 4\pi r^2 dr - \int_{R_{g(t)}}^{R_T} C_{(r,t)} \rho_\gamma 4\pi r^2 dr \right]$$

Desarrollando  $C_{(r,t+\varepsilon)}$

$$= \lim_{\varepsilon \rightarrow 0} \frac{1}{\varepsilon} \left[ \int_{R_{g(t)}}^{R_T} \left( C_{(r,t)} + \frac{dC_{(r,t)}}{dt} \varepsilon + \varphi(\varepsilon^2) \right) \rho_\gamma 4\pi r^2 dr - \int_{R_{g(t+\varepsilon)}}^{R_{g(t+\varepsilon)}} \left( C_{(r,t)} + \frac{dC_{(r,t)}}{dt} \varepsilon + \varphi(\varepsilon^2) \right) \rho_\gamma 4\pi r^2 dr - \int_{R_{g(t)}}^{R_T} C_{(r,t)} \rho_\gamma 4\pi r^2 dr \right]$$

Simplificando términos

$$= \lim_{\varepsilon \rightarrow 0} \frac{1}{\varepsilon} \left[ \int_{R_{g(t)}}^{R_T} \left( \frac{dC_{(r,t)}}{dt} \varepsilon + \varphi(\varepsilon^2) \right) \rho_\gamma 4\pi r^2 dr - \int_{R_{g(t+\varepsilon)}}^{R_{g(t+\varepsilon)}} \left( C_{(r,t)} + \frac{dC_{(r,t)}}{dt} \varepsilon + \varphi(\varepsilon^2) \right) \rho_\gamma 4\pi r^2 dr \right]$$

Siguiendo los mismos pasos que en los casos anteriores se obtiene

$$\frac{\partial}{\partial t} \left[ \int_{R_{g(t)}}^{R_T} C_{(r,t)} \rho_\gamma 4\pi r^2 dr \right] = \int_{R_{g(t)}}^{R_T} \frac{dC_{(r,t)}}{dt} \rho_\gamma 4\pi r^2 dr - C_{(R_{g(t)},t)} \rho_\gamma 4\pi R_{g(t)}^2 \frac{dR_{g(t)}}{dt} \quad (\text{AP- I.5})$$

Teniendo en cuenta que según la segunda ley de Fick se cumple

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

El primer término del segundo miembro de la expresión (AP- I.5) puede ser expresado de una manera más conveniente

$$\begin{aligned} \int_{R_{g(t)}}^{R_T} \frac{dC_{(r,t)}}{dt} \rho_\gamma 4\pi r^2 dr &= \int_{R_{g(t)}}^{R_T} D \left( \frac{\partial^2 C_{(r,t)}}{\partial r^2} + \frac{2}{r} \frac{\partial C_{(r,t)}}{\partial r} \right) \rho_\gamma 4\pi r^2 dr \\ &= \int_{R_{g(t)}}^{R_T} D \frac{\partial^2 C_{(r,t)}}{\partial r^2} \rho_\gamma 4\pi r^2 dr + \int_{R_{g(t)}}^{R_T} D \frac{2}{r} \frac{\partial C_{(r,t)}}{\partial r} \rho_\gamma 4\pi r^2 dr \\ &= D \rho_\gamma 4\pi \left[ \int_{R_{g(t)}}^{R_T} \frac{\partial^2 C_{(r,t)}}{\partial r^2} r^2 dr + \int_{R_{g(t)}}^{R_T} 2 \frac{\partial C_{(r,t)}}{\partial r} r dr \right] \end{aligned}$$

Integrando por partes el primer término del segundo miembro de la expresión anterior

$$\int_{R_{g(t)}}^{R_T} \frac{dC_{(r,t)}}{dt} \rho_\gamma 4\pi r^2 dr = D \rho_\gamma 4\pi \left[ \left( r^2 \frac{\partial C_{(r,t)}}{\partial r} \right) \Big|_{R_{g(t)}}^{R_T} - \int_{R_{g(t)}}^{R_T} 2 \frac{\partial C_{(r,t)}}{\partial r} r dr + \int_{R_{g(t)}}^{R_T} 2 \frac{\partial C_{(r,t)}}{\partial r} r dr \right]$$

Dado que el gradiente de concentración en  $R_T$  es nulo, la fórmula se puede escribir

$$\int_{R_{g(t)}}^{R_T} \frac{dC_{(r,t)}}{dt} \rho_\gamma 4\pi r^2 dr = -D \rho_\gamma 4\pi R_{g(t)}^2 \frac{\partial C_{(r,t)}}{\partial r} \Big|_{R_{g(t)}}$$

y teniendo en cuenta que en el cálculo sólo se trabajará con gradiente de concentración negativo en  $R_g$

$$\int_{R_{g(t)}}^{R_T} \frac{dC_{(r,t)}}{dt} \rho_\gamma 4\pi r^2 dr = D \rho_\gamma 4\pi R_{g(t)}^2 \frac{\partial C_{(r,t)}}{\partial r} \Big|_{R_{g(t)}}$$

De manera que (AP- I.15) se puede escribir como

$$\frac{\partial}{\partial t} \left[ \int_{R_{g(t)}}^{R_T} C_{(r,t)} \rho_\gamma 4\pi r^2 dr \right] = D \rho_\gamma 4\pi R_{g(t)}^2 \frac{\partial C_{(r,t)}}{\partial r} \Big|_{R_{g(t)}} - C_{(R_{g(t)},t)} \rho_\gamma 4\pi R_{g(t)}^2 \frac{dR_{g(t)}}{dt}$$

teniendo en cuenta la nomenclatura del la Figura AP- I.1

$$\frac{\partial}{\partial t} \left[ \int_{R_{g(t)}}^{R_T} C_{(r,t)} \rho_\gamma 4\pi r^2 dr \right] = D \rho_\gamma 4\pi R_g^2 \frac{\partial C}{\partial r} \Big|_{R_g} - C^{II\gamma} \rho_\gamma 4\pi R_g^2 \frac{dR_g}{dt} \tag{AP- I.6}$$

Remplazando en la expresión (AP- I.2)

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t} \int_0^{R_r} C_{(r,t)} \rho_\gamma 4\pi r^2 dr = C^{\gamma/l} \rho_\gamma 4\pi R_n^2 \frac{dR_n}{dt} + \frac{dC^{l/\gamma}}{dt} \rho_\gamma \frac{4}{3} \pi (R_g^3 - R_n^3) - C^{l/\gamma} \rho_\gamma 4\pi R_n^2 \frac{dR_n}{dt} + \\ + C^{l/\gamma} \rho_\gamma 4\pi R_g^2 \frac{dR_g}{dt} + D \rho_\gamma 4\pi R_g^2 \left. \frac{\partial C}{\partial r} \right|_{R_g} - C^{l/\gamma} \rho_\gamma 4\pi R_g^2 \frac{dR_g}{dt} \end{aligned}$$

Reacomodando términos e igualando a 0

$$C^{l/\gamma} (k-1) \rho_\gamma 4\pi R_n^2 \frac{dR_n}{dt} + \frac{dC^{l/\gamma}}{dt} \rho_\gamma \frac{4}{3} \pi (R_g^3 - R_n^3) + D \rho_\gamma 4\pi R_g^2 \left. \frac{\partial C}{\partial r} \right|_{R_g} = 0$$

Despejando  $dR_n / dt$  se obtiene

$$\frac{dR_n}{dt} = \frac{3D R_g^2 \left. \frac{\partial C}{\partial r} \right|_{R_g} + \frac{dC^{l/\gamma}}{dt} (R_g^3 - R_n^3)}{3C^{l/\gamma} (1-k) R_n^2} \quad (\text{AP- I.7})$$

b) *Desarrollo incremental*

Siendo  $F_{(t)}$

$$F_{(t)} = \int_0^{R_r} C_{(r,t)} 4\pi r^2 dr$$

se puede aproximar su derivada con respecto al tiempo según

$$\frac{dF_{(t)}}{dt} \simeq \frac{F_{(t+\Delta t)} - F_{(t)}}{\Delta t} \quad (\text{AP- I.8})$$

La expresión (AP- I.8) debe ser igual a cero si se conserva la cantidad de carbono en el grano.

En la Figura AP- I.2 se observan los perfiles de concentración de carbono en función del radio para un tiempo  $t$  y un tiempo  $t+\Delta t$ . Los valores de concentración y radio para un tiempo  $t+\Delta t$  se distinguen con un tilde. La relación entre la concentración del sólido y la del líquido en la intercara en condiciones de equilibrio está dada por el coeficiente de partición  $k$ .



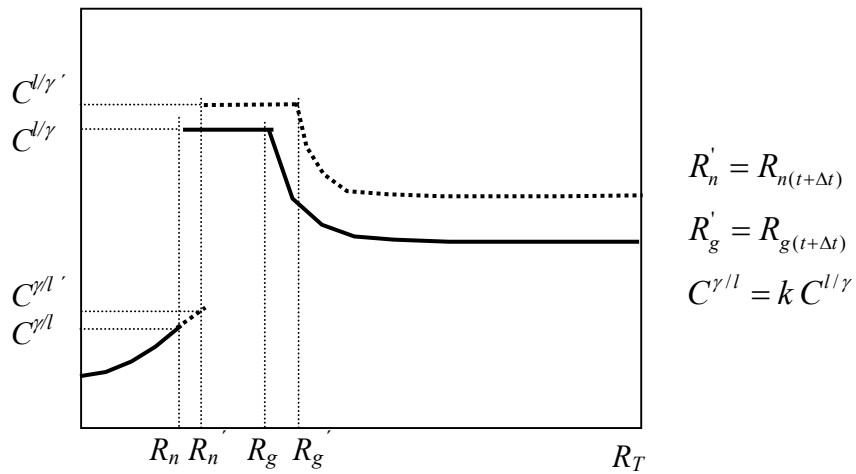


Figura AP- I.2

Se analiza la variación de la cantidad de carbono en cada zona por separado, restando la cantidad de carbono en el tiempo  $t$  a la cantidad de carbono en el tiempo  $t+\Delta t$ :

**Zona 1**

para  $(t+\Delta t)$

$$\int_0^{R_n} C_{(r)}^{z1} \rho_{\gamma} 4\pi r^2 dr + \int_{R_n}^{R_n'} C_{(r)}^{z1} \rho_{\gamma} 4\pi r^2 dr$$

para  $(t)$

$$\int_0^{R_n} C_{(r)}^{z1} \rho_{\gamma} 4\pi r^2 dr$$

La variación de carbono de la zona 1 resulta

$$\int_{R_n}^{R_n'} C_{(r)}^{z1} \rho_{\gamma} 4\pi r^2 dr$$

(AP- I.9)

**Zona 2**para  $(t+\Delta t)$ 

$$\int_{R_n}^{R_g} C^{ll\gamma'} \rho_\gamma 4\pi r^2 dr - \int_{R_n}^{R_n^i} C^{ll\gamma'} \rho_\gamma 4\pi r^2 dr + \int_{R_g}^{R_g^i} C^{ll\gamma'} \rho_\gamma 4\pi r^2 dr$$

para  $(t)$ 

$$\int_{R_n}^{R_g} C^{ll\gamma} \rho_\gamma 4\pi r^2 dr$$

Restando para la zona 2 se obtiene

$$\int_{R_n}^{R_g} (C^{ll\gamma'} - C^{ll\gamma}) \rho_\gamma 4\pi r^2 dr - \int_{R_n}^{R_n^i} C^{ll\gamma'} \rho_\gamma 4\pi r^2 dr + \int_{R_g}^{R_g^i} C^{ll\gamma'} \rho_\gamma 4\pi r^2 dr \quad (\text{AP- I.10})$$

**Zona 3**para  $(t+\Delta t)$ 

$$\int_{R_g}^{R_f} C_{(r,t+\Delta t)}^{z3} \rho_\gamma 4\pi r^2 dr - \int_{R_g}^{R_g^i} C_{(r,t+\Delta t)}^{z3} \rho_\gamma 4\pi r^2 dr$$

para  $(t)$ 

$$\int_{R_g}^{R_f} C_{(r,t)}^{z3} \rho_\gamma 4\pi r^2 dr$$

Restando para la zona 3 se obtiene

$$\int_{R_g}^{R_f} (C_{(r,t+\Delta t)}^{z3} - C_{(r,t)}^{z3}) \rho_\gamma 4\pi r^2 dr - \int_{R_g}^{R_g^i} C_{(r,t+\Delta t)}^{z3} \rho_\gamma 4\pi r^2 dr \quad (\text{AP- I.11})$$

La expresión (AP- I.11) puede escribirse también como

$$\int_{R_g}^{R_f} \frac{(C_{(r,t+\Delta t)}^{z3} - C_{(r,t)}^{z3})}{\Delta t} \Delta t \rho_\gamma 4\pi r^2 dr - \int_{R_g}^{R_g^i} C_{(r,t+\Delta t)}^{z3} \rho_\gamma 4\pi r^2 dr$$

Si se considera

$$\frac{(C_{(r,t+\Delta t)}^{z3} - C_{(r,t)}^{z3})}{\Delta t} \simeq \frac{dC^{z3}}{dt}$$

entonces

$$\int_{R_g}^{R_T} \frac{dC^{z3}}{dt} \Delta t \rho_\gamma 4\pi r^2 dr - \int_{R_g}^{R'_g} C_{(r,t+\Delta t)}^{z3} \rho_\gamma 4\pi r^2 dr \quad (\text{AP- I.12})$$

Sumando las expresiones (AP- I.9), (AP- I.10) y (AP- I.12) e igualando a 0

$$\int_{R_n}^{R'_n} C_{(r)}^{z1} \rho_\gamma 4\pi r^2 dr + \int_{R_n}^{R_g} (C^{l/\gamma'} - C^{l/\gamma}) \rho_\gamma 4\pi r^2 dr - \int_{R_n}^{R'_n} C^{l/\gamma'} \rho_\gamma 4\pi r^2 dr + \int_{R_g}^{R'_g} C^{l/\gamma'} \rho_\gamma 4\pi r^2 dr$$

$$\int_{R_g}^{R_T} \frac{dC^{z3}}{dt} \Delta t \rho_\gamma 4\pi r^2 dr - \int_{R_g}^{R'_g} C_{(r,t+\Delta t)}^{z3} \rho_\gamma 4\pi r^2 dr = 0$$

Acomodando términos y límites

$$\int_{R_n}^{R'_n} (C_{(r)}^{z1} - C^{l/\gamma'}) \rho_\gamma 4\pi r^2 dr + \int_{R_n}^{R'_n} (C^{l/\gamma'} - C^{l/\gamma}) \rho_\gamma 4\pi r^2 dr + \int_{R_n}^{R'_n} (C^{l/\gamma'} - C^{l/\gamma}) \rho_\gamma 4\pi r^2 dr$$

$$+ \int_{R_g}^{R'_g} C^{l/\gamma'} \rho_\gamma 4\pi r^2 dr + \int_{R_g}^{R_T} \frac{dC^{z3}}{dt} \Delta t \rho_\gamma 4\pi r^2 dr - \int_{R_g}^{R'_g} C_{(r,t+\Delta t)}^{z3} \rho_\gamma 4\pi r^2 dr = 0$$

Considerando

$$\int_{R_g}^{R'_g} C^{l/\gamma'} \rho_\gamma 4\pi r^2 dr \simeq \int_{R_g}^{R'_g} C_{(r,t+\Delta t)}^{z3} \rho_\gamma 4\pi r^2 dr$$

Suponiendo  $C_{(r)}^{z1}$  constante e igual a  $C^{\gamma l}$  en el intervalo  $[R_n, R_n]$ , se puede expresar el balance de masa como

$$\int_{R_n}^{R'_n} C^{l/\gamma'} (k-1) \rho_\gamma 4\pi r^2 dr + \int_{R_n}^{R'_n} (C^{l/\gamma'} - C^{l/\gamma}) \rho_\gamma 4\pi r^2 dr + \int_{R_g}^{R_T} \frac{dC^{z3}}{dt} \Delta t \rho_\gamma 4\pi r^2 dr = 0 \quad (\text{AP- I.13})$$

Integrando y teniendo en cuenta la segunda ley de Fick para el tercer término de la ecuación anterior se obtiene

$$C^{l/\gamma} (k-1) \frac{4}{3} \pi (R_n'^3 - R_n^3) + (C^{l/\gamma'} - C^{l/\gamma}) \frac{4}{3} \pi (R_g^3 - R_n'^3) + D4\pi R_g^2 \left. \frac{dC}{dr} \right|_{R_g} \Delta t = 0 \quad (\text{AP- I.14})$$

Despejando  $R_n'$  se llega a la siguiente fórmula

$$R_n' = \sqrt[3]{\frac{3DR_g^2 \left. \frac{dC}{dr} \right|_{R_g} \Delta t + C^{l/\gamma} (1-k) R_n^3 + (C^{l/\gamma'} - C^{l/\gamma}) R_g^3}{C^{l/\gamma} (1-k) + (C^{l/\gamma'} - C^{l/\gamma})}} \quad (\text{AP- I.15})$$

### AP-I.3. EUTÉCTICO

Si se tiene en cuenta la presencia de nódulos de grafito distribuidos en las tres zonas, el perfil de concentración se podría representar esquemáticamente como lo muestra la Figura AP- I.3. Para evitar la complicación que la presencia de dichos nódulos introduce en el planteo del balance de masa, sobre todo cuando la concentración en el líquido es variable, se considera el volumen de las esferitas repartido, de manera continua y no discreta, en la totalidad del volumen del grano. De esta manera se puede calcular el volumen de carbono de los nódulos de las zonas 1, 2 y 3 por unidad de volumen de la misma zona, dando  $U_{gr}^{z1}$ ,  $U_{gr}^{z2}$  y  $U_{gr}^{z3}$  respectivamente.

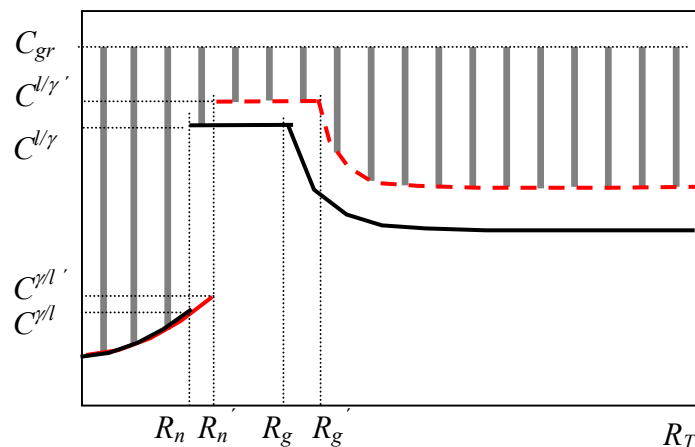


Figura AP- I.3

Ahora el balance de masa entre los tiempos  $t$  y  $t+\Delta t$  se puede plantear de manera incremental de la siguiente forma

**Zona 1**para  $(t+\Delta t)$ 

$$\int_0^{R_n} C_{(r)}^{z1} \rho_\gamma 4\pi r^2 dr + \int_{R_n}^{R_n'} C_{(r)}^{z1} \rho_\gamma 4\pi r^2 dr - \int_0^{R_n} C_{(r)}^{z1} U_{gr}^{z1} \rho_\gamma 4\pi r^2 dr - \int_{R_n}^{R_n'} C_{(r)}^{z1} U_{gr}^{z2} \rho_\gamma 4\pi r^2 dr + \\ + \int_0^{R_n} C_{gr} U_{gr}^{z1} \rho_{gr} 4\pi r^2 dr + \int_{R_n}^{R_n'} C_{gr} U_{gr}^{z2} \rho_{gr} 4\pi r^2 dr$$

para  $(t)$ 

$$\int_0^{R_n} C_{(r)}^{z1} \rho_\gamma 4\pi r^2 dr - \int_0^{R_n} C_{(r)}^{z1} U_{gr}^{z1} \rho_\gamma 4\pi r^2 dr + \int_0^{R_n} C_{gr} U_{gr}^{z1} \rho_{gr} 4\pi r^2 dr$$

La variación de carbono de la zona 1 resulta

$$\int_{R_n}^{R_n'} C_{(r)}^{z1} (1 - U_{gr}^{z2}) \rho_\gamma 4\pi r^2 dr + \int_{R_n}^{R_n'} C_{gr} U_{gr}^{z2} \rho_{gr} 4\pi r^2 dr \quad (\text{AP- I.16})$$

**Zona 2**para  $(t+\Delta t)$ 

$$\int_{R_n}^{R_g} C^{l/\gamma'} \rho_\gamma 4\pi r^2 dr - \int_{R_n}^{R_n'} C^{l/\gamma'} \rho_\gamma 4\pi r^2 dr + \int_{R_g}^{R_g'} C^{l/\gamma'} \rho_\gamma 4\pi r^2 dr \\ - \int_{R_n}^{R_g} C^{l/\gamma'} U_{gr}^{z2} \rho_\gamma 4\pi r^2 dr + \int_{R_n}^{R_g} C_{gr} U_{gr}^{z2} \rho_{gr} 4\pi r^2 dr \\ + \int_{R_n}^{R_n'} C^{l/\gamma'} U_{gr}^{z2} \rho_\gamma 4\pi r^2 dr - \int_{R_n}^{R_n'} C_{gr} U_{gr}^{z2} \rho_{gr} 4\pi r^2 dr \\ - \int_{R_g}^{R_g'} C^{l/\gamma'} U_{gr}^{z3} \rho_\gamma 4\pi r^2 dr + \int_{R_g}^{R_g'} C_{gr} U_{gr}^{z3} \rho_{gr} 4\pi r^2 dr$$

para  $(t)$ 

$$\int_{R_n}^{R_g} C^{l/\gamma'} \rho_\gamma 4\pi r^2 dr - \int_{R_n}^{R_g} C^{l/\gamma'} U_{gr}^{z2} \rho_\gamma 4\pi r^2 dr + \int_{R_n}^{R_g} C_{gr} U_{gr}^{z2} \rho_{gr} 4\pi r^2 dr$$

Restando se obtiene para la zona 2

$$\begin{aligned}
& \int_{R_n}^{R_g} (C^{l/\gamma'} - C^{l/\gamma}) (1 - U_{gr}^{z2}) \rho_\gamma 4\pi r^2 dr - \int_{R_n}^{R_n'} C^{l/\gamma'} (1 - U_{gr}^{z2}) \rho_\gamma 4\pi r^2 dr + \\
& + \int_{R_g}^{R_g'} C^{l/\gamma'} (1 - U_{gr}^{z3}) \rho_\gamma 4\pi r^2 dr - \int_{R_n}^{R_n'} C_{gr} U_{gr}^{z2} \rho_{gr} 4\pi r^2 dr + \int_{R_g}^{R_g'} C_{gr} U_{gr}^{z3} \rho_{gr} 4\pi r^2 dr
\end{aligned} \tag{AP- I.17}$$

### Zona 3

para  $(t + \Delta t)$

$$\begin{aligned}
& \int_{R_g}^{R_T} C_{(r,t+\Delta t)}^{z3} \rho_\gamma 4\pi r^2 dr - \int_{R_g}^{R_g'} C_{(r,t+\Delta t)}^{z3} \rho_\gamma 4\pi r^2 dr - \\
& - \int_{R_g}^{R_T} C_{(r,t+\Delta t)}^{z3} U_{gr}^{z3} \rho_\gamma 4\pi r^2 dr + \int_{R_g}^{R_T} C_{gr} U_{gr}^{z3} \rho_{gr} 4\pi r^2 dr + \\
& + \int_{R_g}^{R_g'} C_{(r,t+\Delta t)}^{z3} U_{gr}^{z3} \rho_\gamma 4\pi r^2 dr - \int_{R_g}^{R_g'} C_{gr} U_{gr}^{z3} \rho_{gr} 4\pi r^2 dr
\end{aligned}$$

para  $(t)$

$$\int_{R_g}^{R_T} C_{(r,t)}^{z3} \rho_\gamma 4\pi r^2 dr - \int_{R_g}^{R_g'} C_{(r,t)}^{z3} U_{gr}^{z3} \rho_\gamma 4\pi r^2 dr + \int_{R_g}^{R_T} C_{gr} U_{gr}^{z3} \rho_{gr} 4\pi r^2 dr$$

Restando se obtiene para la zona 3

$$\begin{aligned}
& \int_{R_g}^{R_T} (C_{(r,t+\Delta t)}^{z3} - C_{(r,t)}^{z3}) \rho_\gamma 4\pi r^2 dr - \int_{R_g}^{R_g'} C_{(r,t+\Delta t)}^{z3} (1 - U_{gr}^{z3}) \rho_\gamma 4\pi r^2 dr - \\
& - \int_{R_g}^{R_T} (C_{(r,t+\Delta t)}^{z3} - C_{(r,t)}^{z3}) U_{gr}^{z3} \rho_\gamma 4\pi r^2 dr - \int_{R_g}^{R_g'} C_{gr} U_{gr}^{z3} \rho_{gr} 4\pi r^2 dr
\end{aligned} \tag{AP- I.18}$$

La ecuación (AP- I.18) puede expresarse también como

$$\begin{aligned}
& \int_{R_g}^{R_T} \frac{(C_{(r,t+\Delta t)}^{z3} - C_{(r,t)}^{z3})}{\Delta t} \Delta t (1 - U_{gr}^{z3}) \rho_\gamma 4\pi r^2 dr - \int_{R_g}^{R_g'} C_{(r,t+\Delta t)}^{z3} (1 - U_{gr}^{z3}) \rho_\gamma 4\pi r^2 dr - \\
& - \int_{R_g}^{R_g'} C_{gr} U_{gr}^{z3} \rho_{gr} 4\pi r^2 dr
\end{aligned}$$

Si se considera

$$\frac{(C_{(r,t+\Delta t)}^{z3} - C_{(r,t)}^{z3})}{\Delta t} \simeq \frac{dC^{z3}}{dt}$$

entonces aplicando la segunda ley de Fick se obtiene

$$\begin{aligned} & \int_{R_g}^{R_T} \frac{dC^{z3}}{dt} \Delta t (1 - U_{gr}^{z3}) \rho_\gamma 4\pi r^2 dr - \int_{R_g}^{R'_g} C_{(r,t+\Delta t)}^{z3} (1 - U_{gr}^{z3}) \rho_\gamma 4\pi r^2 dr - \\ & - \int_{R_g}^{R'_g} C_{gr}^{z3} U_{gr}^{z3} \rho_{gr} 4\pi r^2 dr \end{aligned} \quad (\text{AP- I.19})$$

Sumando las expresiones (AP- I.16), (AP- I.17) y (AP- I.19) e igualando a 0

$$\begin{aligned} & \int_{R_n}^{R'_n} (C_{(r)}^{z1} - C^{l/\gamma'}) (1 - U_{gr}^{z2}) \rho_\gamma 4\pi r^2 dr + \int_{R_n}^{R_g} (C^{l/\gamma'} - C^{l/\gamma}) (1 - U_{gr}^{z2}) \rho_\gamma 4\pi r^2 dr + \\ & + \int_{R_g}^{R'_g} C^{l/\gamma'} (1 - U_{gr}^{z3}) \rho_\gamma 4\pi r^2 dr - \int_{R_g}^{R'_g} C_{(r,t+\Delta t)}^{z3} (1 - U_{gr}^{z3}) \rho_\gamma 4\pi r^2 dr + \\ & + \int_{R_g}^{R_T} \frac{dC^{z3}}{dt} \Delta t (1 - U_{gr}^{z3}) \rho_\gamma 4\pi r^2 dr = 0 \end{aligned} \quad (\text{AP- I.20})$$

Considerando

$$+ \int_{R_g}^{R'_g} C^{l/\gamma'} (1 - U_{gr}^{z3}) \rho_\gamma 4\pi r^2 dr \simeq \int_{R_g}^{R'_g} C_{(r,t+\Delta t)}^{z3} (1 - U_{gr}^{z3}) \rho_\gamma 4\pi r^2 dr$$

Simplificando términos y reacomodando límites

$$\begin{aligned} & \int_{R_n}^{R'_n} (C_{(r)}^{z1} - C^{l/\gamma'}) (1 - U_{gr}^{z2}) \rho_\gamma 4\pi r^2 dr + \int_{R_n}^{R'_n} (C^{l/\gamma'} - C^{l/\gamma}) (1 - U_{gr}^{z2}) \rho_\gamma 4\pi r^2 dr + \\ & + \int_{R_n}^{R_g} (C^{l/\gamma'} - C^{l/\gamma}) (1 - U_{gr}^{z2}) \rho_\gamma 4\pi r^2 dr + \int_{R_g}^{R_T} \frac{dC^{z3}}{dt} \Delta t (1 - U_{gr}^{z3}) \rho_\gamma 4\pi r^2 dr = 0 \end{aligned} \quad (\text{AP- I.21})$$

Suponiendo  $C_{(r)}^{z1}$  constante e igual a  $C^{\gamma/l}$  en el intervalo  $[R_n, R_n']$ , se puede expresar el balance de masa como

$$\begin{aligned} & \int_{R_n}^{R'_n} C^{l/\gamma} (k - 1) (1 - U_{gr}^{z2}) \rho_\gamma 4\pi r^2 dr + \int_{R_n}^{R'_n} (C^{l/\gamma'} - C^{l/\gamma}) (1 - U_{gr}^{z2}) \rho_\gamma 4\pi r^2 dr + \\ & + \int_{R_g}^{R_T} \frac{dC^{z3}}{dt} \Delta t (1 - U_{gr}^{z3}) \rho_\gamma 4\pi r^2 dr = 0 \end{aligned} \quad (\text{AP- I.22})$$

Si en el cálculo se considera que la ley de nucleación de los nódulos de grafito es la misma para las zonas 2 y 3 y además se hace crecer dichos nódulos con incrementos de radio promedio entre ambas zonas entonces resulta

$$U_{gr}^{z2} = U_{gr}^{z3}$$

Por lo tanto la expresión (AP- I.22) puede escribirse de la siguiente manera

$$\int_{R_n}^{R_n'} C^{l/\gamma} (k-1) 4\pi r^2 dr + \int_{R_n}^{R_g} (C^{l/\gamma'} - C^{l/\gamma}) 4\pi r^2 dr + \int_{R_g}^{R_T} \frac{dC}{dt} \Delta t 4\pi r^2 dr = 0$$

Integrando y teniendo en cuenta la segunda ley de Fick para el último término de la ecuación anterior

$$C^{l/\gamma} (k-1) \frac{4}{3} \pi (R_n'^3 - R_n^3) + (C^{l/\gamma'} - C^{l/\gamma}) \frac{4}{3} \pi (R_g^3 - R_n^3) + D 4\pi R_g^2 \left. \frac{dC}{dr} \right|_{R_g} \Delta t = 0 \quad (\text{AP- I.23})$$

Despejando  $R_n'$  se obtiene

$$R_n' = \sqrt[3]{\frac{3DR_g^2 \left. \frac{dC}{dr} \right|_{R_g} \Delta t + C^{l/\gamma} (1-k) R_n^3 + (C^{l/\gamma'} - C^{l/\gamma}) R_g^3}{C^{l/\gamma} (1-k) + (C^{l/\gamma'} - C^{l/\gamma})}} \quad (\text{AP- I.24})$$

Puede observarse que las expresiones (AP- I.15) y (AP- I.24) son iguales.

#### AP-I.4. CÁLCULO DE LA CONCENTRACIÓN PROMEDIO EN LA ZONA 3 PARA $T+\Delta T$

De la ecuación (AP- I.23) se deduce que el flujo de soluto en la superficie esférica de radio  $R_g$  es igual al incremento de soluto que se muestra sombreado en la Figura AP- I.4.

En base a la Figura AP- I.4 se puede calcular la concentración promedio  $C_{pro}'$  de la zona 3 en el tiempo  $t+\Delta t$



$$\int_{R_g'}^{R_T} C_{pro}' (1-U_{gr}^{z3}) \rho_\gamma 4\pi r^2 dr - \int_{R_g}^{R_T} C_{pro} (1-U_{gr}^{z3}) \rho_\gamma 4\pi r^2 dr -$$

$$-D\rho_\gamma 4\pi R_g'^2 \left. \frac{dC}{dr} \right|_{R_g} (1-U_{gr}^{z3}) \Delta t + \int_{R_g}^{R_g'} C^{l/\gamma'} (1-U_{gr}^{z3}) \rho_\gamma 4\pi r^2 dr = 0$$

Integrando

$$\int_{R_g'}^{R_T} C_{pro}' \rho_\gamma 4\pi r^2 dr = \int_{R_g}^{R_T} C_{pro} \rho_\gamma 4\pi r^2 dr + D\rho_\gamma 4\pi R_g'^2 \left. \frac{dC}{dr} \right|_{R_g} \Delta t - \int_{R_g}^{R_g'} C^{l/\gamma'} \rho_\gamma 4\pi r^2 dr$$

$$C_{pro}' \frac{4}{3} \pi (R_T^3 - R_g'^3) = C_{pro} \frac{4}{3} \pi (R_T^3 - R_g^3) + D\rho_\gamma 4\pi R_g'^2 \left. \frac{dC}{dr} \right|_{R_g} - C^{l/\gamma'} \frac{4}{3} \pi (R_T^3 - R_g^3)$$

Despejando la incógnita  $C_{pro}'$

$$C_{pro}' = \frac{C_{pro} (R_T^3 - R_g^3) + 3D\rho_\gamma R_g'^2 \left. \frac{dC}{dr} \right|_{R_g} - C^{l/\gamma'} (R_T^3 - R_g'^3)}{(R_T^3 - R_g'^3)} \tag{AP- I.25}$$

Simplificando (AP- I.25) se obtiene la siguiente expresión para  $C_{pro}'$

$$C_{pro}' = \frac{C_{pro} (R_T^3 - R_g^3) + 3D\rho_\gamma R_g'^2 \left. \frac{dC}{dr} \right|_{R_g} - C^{l/\gamma'}}{(R_T^3 - R_g'^3)} \tag{AP- I.26}$$

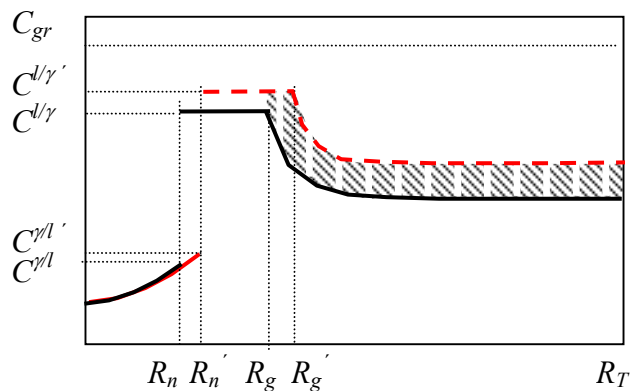


Figura AP- I.4



## APÉNDICE II

### CÁLCULO DE $C_{\infty}$ A PARTIR DE UNA DISTRIBUCIÓN UNIFORME

#### AP-II.1. INTRODUCCIÓN

En la simulación numérica de la solidificación de la fundición nodular que se presenta en esta tesis el perfil real de concentración de soluto de la llamada *zona 3* es reemplazado para algunos cálculos por una concentración promedio que conserva la cantidad de masa de carbono, Figura AP- II.1 (b) y para otros por un perfil conformado por dos partes, una de de espesor  $\delta$  y variación lineal (capa límite) y otra constante de valor  $C_{\infty g}$ , Figura AP- II.1 (a).

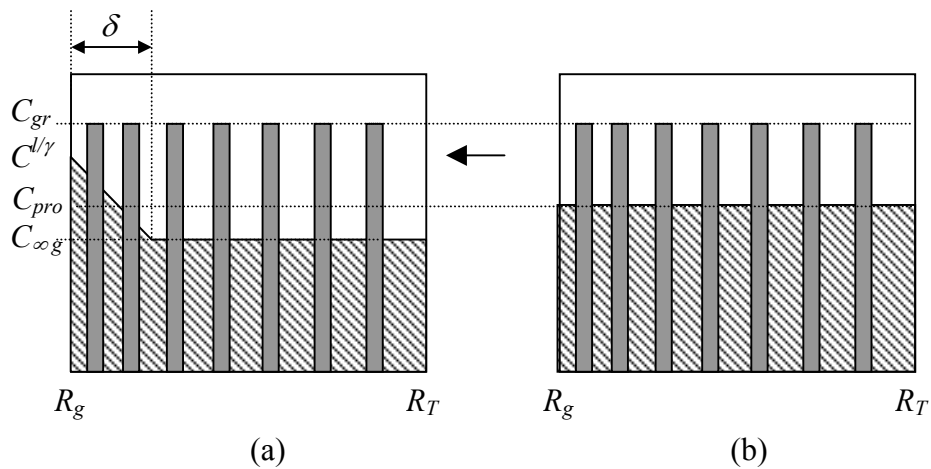


Figura AP- II.1

En este apéndice se detalla la obtención de  $C_{\infty g}$  a partir de una concentración uniforme  $C_{pro}$  y de valores conocidos de  $\delta$ ,  $R_g$ ,  $R_T$  y  $C^{l/\gamma}$ .

Según sean los valores de  $\delta$ ,  $R_g$  y  $R_T$  pueden darse dos situaciones:

$$\delta + R_g < R_T \quad \text{o} \quad \delta + R_g > R_T$$

### AP-II.2. CÁLCULO DE $C_{\infty g}$ CUANDO $\delta + R_g < R_T$

Conocidos  $\delta$ ,  $C^{l/\gamma}$ ,  $C_{pro}$ ,  $R_g$  y  $R_T$  y haciendo un planteo de equilibrio de masa de soluto, es posible obtener  $C_{\infty g}$ .

Cuando  $R_g + \delta < R_T$  el perfil de concentración se vería como en la Figura AP- II.2

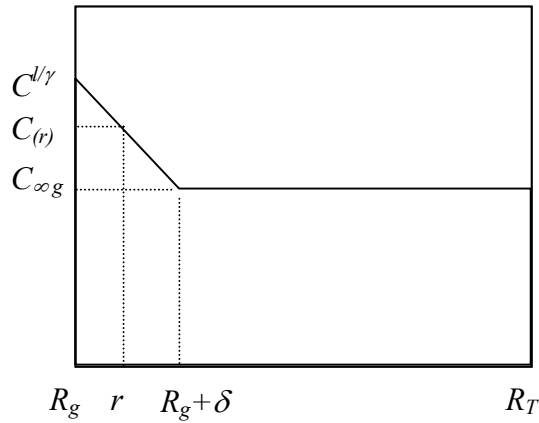


Figura AP- II.2

La expresión de  $C(r)$  en función del radio, en la zona comprendida por  $R_g$  y  $R_g + \delta$  es

$$C(r) = C_{\infty g} + \frac{[\delta - (r - R_g)](C^{l/\gamma} - C_{\infty g})}{\delta} \quad (\text{AP- II.1})$$

Planteando balance de masa de soluto se puede expresar

$$\begin{aligned} & \int_{R_g}^{R_T} C_{pro} 4\pi \rho_\gamma r^2 dr - \int_{R_g}^{R_T} C_{pro} U_{gr}^{z3} 4\pi \rho_\gamma r^2 dr + \int_{R_g}^{R_T} C_{gr} U_{gr}^{z3} 4\pi \rho_{gr} r^2 dr = \\ & = \int_{R_g}^{R_g + \delta} C(r) 4\pi \rho_\gamma r^2 dr - \int_{R_g}^{R_g + \delta} C(r) U_{gr}^{z3} 4\pi \rho_\gamma r^2 dr + \int_{R_g}^{R_g + \delta} C_{gr} U_{gr}^{z3} 4\pi \rho_{gr} r^2 dr + \\ & + \int_{R_g + \delta}^{R_T} C_{\infty g} 4\pi \rho_\gamma r^2 dr - \int_{R_g + \delta}^{R_T} C_{\infty g} U_{gr}^{z3} 4\pi \rho_\gamma r^2 dr + \int_{R_g + \delta}^{R_T} C_{gr} U_{gr}^{z3} 4\pi \rho_{gr} r^2 dr \end{aligned} \quad (\text{AP- II.2})$$

Simplificando la ecuación (AP- II.2) se obtiene

$$\int_{R_g}^{R_T} C_{pro} (1-U_{gr}^{z3}) 4\pi \rho_\gamma r^2 dr = \int_{R_g}^{R_g+\delta} C_{(r)} (1-U_{gr}^{z3}) 4\pi \rho_\gamma r^2 dr + \int_{R_g+\delta}^{R_T} C_\infty (1-U_{gr}^{z3}) \rho_\gamma 4\pi r^2 dr \quad (\text{AP- II.3})$$

$$\frac{1}{3} C_{pro} (R_T^3 - R_g^3) = \int_{R_g}^{R_g+\delta} C_{(r)} (1-U_{gr}^{z3}) 4\pi \rho_\gamma r^2 dr + \frac{1}{3} C_\infty [R_T^3 - (R_g + \delta)^3] \quad (\text{AP- II.4})$$

Remplazando (AP- II.1) en (AP- II.4)

$$\frac{1}{3} C_{pro} (R_T^3 - R_g^3) = \int_{R_g}^{R_g+\delta} \left[ C_\infty + \frac{[\delta - (r - R_g)] (C^{l\gamma} - C_\infty)}{\delta} \right] (1-U_{gr}^{z3}) 4\pi \rho_\gamma r^2 dr + \frac{1}{3} C_\infty [R_T^3 - (R_g + \delta)^3] \quad (\text{AP- II.5})$$

Resolviendo las integrales y despejando la incógnita  $C_\infty$  se obtiene la siguiente expresión

$$C_{\infty g} = \frac{C_{pro} (R_g^3 - R_T^3) + C^{l\gamma} \delta (6R_g^2 + 4R_g\delta + \delta^2)}{4(R_g^3 - R_T^3) R_g^3 + \delta (6R_g^2 + 4R_g\delta + \delta^2)} \quad (\text{AP- II.6})$$

### AP-II.3. CÁLCULO DE $C_{\infty g}$ CUANDO $\delta + R_g > R_T$

Cuando  $R_g + \delta < R_T$  el perfil de concentración se vería como en la Figura AP- II.3 .

Este perfil no cumple con la condición de que no exista flujo de soluto en la superficie exterior del grano ya que, en  $R_T$ , el gradiente no es nulo. Sin embargo resulta razonable pensar que, a medida que la zona 3 disminuye,  $C_{\infty g}$  aumenta y por lo tanto el gradiente y la velocidad de la punta de las dendritas principales disminuyen. En el algoritmo implementado cuando  $R_g + \delta < R_T$ , sin dejar de cumplir con el equilibrio de masa de soluto, para el cálculo de  $dR_g / dt$  se utiliza el valor de  $C_\infty^*$  en vez de  $C_\infty$  de esta manera se tiene en cuenta la disminución de la velocidad de crecimiento.

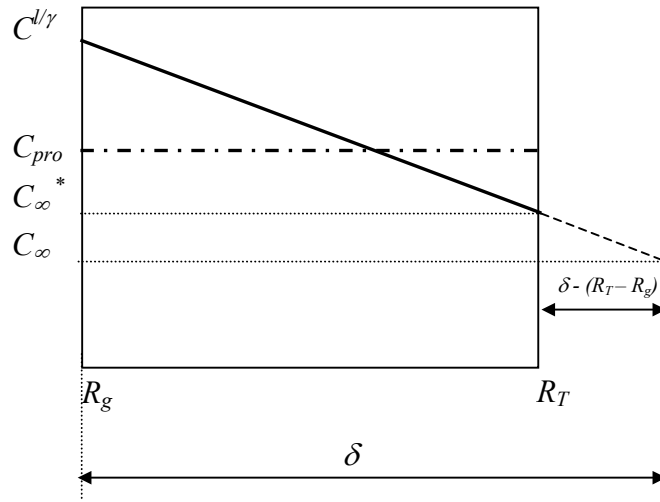


Figura AP- II.3

Teniendo en cuenta que la expresión de  $C(r)$  en función del radio, en la zona comprendida por  $R_g$  y  $R_g + \delta$  (Ver Figura AP- II.3) es

$$C_{(r)} = C_\infty + \frac{[\delta - (r - R_g)](C^{1/\gamma} - C_\infty)}{\delta} \quad (\text{AP- II.7})$$

Planteando balance de masa de soluto simplificando y reacomodando términos se obtiene

$$\int_{R_g}^{R_T} C_{pro} (1 - U_{gr}^{z3}) 4\pi \rho_\gamma r^2 dr = \int_{R_g}^{R_T} C_{(r)} (1 - U_{gr}^{z3}) 4\pi \rho_\gamma r^2 dr \quad (\text{AP- II.8})$$

Remplazando (AP- II.7) en (AP- II.8)

$$\int_{R_g}^{R_T} C_{pro} r^2 dr = \int_{R_g}^{R_T} \left( C_\infty + \frac{[\delta - (r - R_g)](C^{1/\gamma} - C_\infty)}{\delta} \right) r^2 dr \quad (\text{AP- II.9})$$

Resolviendo las integrales y despejando  $C_\infty$

$$C_\infty = \frac{C^{1/\gamma} A_1 - 4C_{pro}\delta A_2}{A_3} \quad (\text{AP- II.10})$$

donde

$$\begin{aligned}
 A_1 &= (R_g^3 + 4R_g^2\delta + R_g^2R_T + 4R_gR_T\delta + R_gR_T^2 - 3R_T^3 + 4R_T^2\delta) \\
 A_2 &= (R_g^2 + R_gR_T + R_T^2) \\
 A_3 &= (R_g^3 + R_g^2R_T + R_gR_T^2 - 3R_T^3)
 \end{aligned}
 \tag{AP- II.11}$$

Para el cálculo de  $C_\infty^*$  es suficiente evaluar (AP- II.7) en  $R_T$

$$C_\infty^* = C_\infty + \frac{[\delta - (R_T - R_g)](C^{l/\gamma} - C_\infty)}{\delta}
 \tag{AP- II.12}$$