

SIMULACIÓN DEL PROCESO DE SOLIDIFICACIÓN DE LA FUNDICIÓN
GRIS CONSIDERANDO UN MODELO MICROESTRUCTURAL

Emilio Pérez, Diego Celentano y Eugenio Oñate

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

RESUMEN

Se presenta un modelo para la simulación de la solidificación de la fundición gris que tiene en cuenta la cinética de la formación de la microestructura a través de los procesos de nucleación y crecimiento de los granos. Este modelo acoplado de transferencia de calor y cinética permite establecer, si bien no toda, alguna información acerca de la microestructura del metal a partir de la cual y con ayuda de ciertas correlaciones se determinan importantes propiedades mecánicas. Los resultados del modelo se discuten y son comparados con otros trabajos experimentales y de modelación.

ABSTRACT

This paper describes a model to simulate the solidification of cast iron accounting for the kinetics of microstructure formation lay means of grain nucleation and growth processes. This coupled model of kinetics and heat transfer allows to know some microstructure features from which many mechanical properties may be predicted. The results obtained with this model are discussed and compared with experimental observations and other existing numerical solutions.

1. INTRODUCCIÓN

Durante los últimos años, se han desarrollado diferentes modelos termomecánicos para la descripción del proceso de la solidificación de metales (ver [1] y referencias allí detalladas). Si bien algunos de estos modelos predicen satisfactoriamente muchos de los fenómenos existentes en dicho proceso, diversos investigadores reconocen la necesidad de formular modelos que incluyan los importantes efectos microestructurales que se desarrollan durante la solidificación y enfriamiento de ciertos metales.

El desarrollo de modelos que describen tanto los fenómenos macro como microscópico es relativamente reciente ^[2] debido, fundamentalmente, a la naturaleza bien diferenciada y compleja de los mismos que trae como consecuencia la dificultad de encuadrar el problema en un único marco fenomenológico.

En este trabajo se presenta un modelo microestructural para describir algunos de los fenómenos presentes en la solidificación de la fundición gris, tales como la cinética de la formación de austenita, la nucleación y el crecimiento concurrente de las células de los

componentes eutéctico estable del grafito y metaestable del carburo de hierro [3]. El modelo permite deducir el tamaño y la densidad de las células eutécticas, las fracciones de hierro gris y blanco, la forma y tamaño de las láminas de grafito e inferir algunas propiedades mecánicas de la fundición tales como la dureza y la resistencia a la tracción.

Este modelo microestructural ha sido acoplado al modelo térmico macroscópico presentado en [1] dentro del marco del método de elementos finitos.

Por último, los resultados obtenidos con el presente modelo se comparan con los de otros modelos y los provenientes de estudios experimentales.

2. MODELO MACROSCOPICO

Sea un dominio abierto y acotado $\Omega \subset \mathbb{R}^{n_{dim}}$ ($1 \leq n_{dim} \leq 3$) la configuración de referencia inicial de un medio continuo conductor de calor no lineal \mathcal{B} cuyos puntos materiales están definidos por $\mathbf{x} \in \bar{\Omega}$, siendo $\Gamma = \partial\Omega$ su contorno suave y $\Upsilon \subset \mathbb{R}^+$ el intervalo de tiempo de análisis ($t \in \Upsilon$). Además, se tiene que $\bar{\Omega} = \Omega \cup \Gamma$. El problema consiste en encontrar un campo de temperaturas absolutas $T : \bar{\Omega} \times \Upsilon \rightarrow \mathbb{R}^+$ de manera que :

$$\rho_o \dot{\omega} = -\nabla \cdot \mathbf{q} + \rho_o r \quad \text{in } \Omega \times \Upsilon, \quad (2.1)$$

$$\omega = \dot{\omega}(\mathbf{x}, t) \quad \text{in } \Omega \times \Upsilon, \quad (2.2)$$

$$\mathbf{q} = \dot{\mathbf{q}}(\mathbf{x}, t) \quad \text{in } \Omega \times \Upsilon, \quad (2.3)$$

sujeto a las condiciones de contorno

$$T = \bar{T} \quad \text{in } \Gamma_T \times \Upsilon, \quad (2.4)$$

$$\mathbf{q} \cdot \mathbf{n} = -\bar{q} - q^* \quad \text{in } \Gamma_q \times \Upsilon, \quad (2.5)$$

y las condiciones iniciales,

$$T(\mathbf{x}, t)|_{t=0} = T_o(\mathbf{x}) \quad \text{in } \Omega. \quad (2.6)$$

La ecuación (2.1) expresa el balance de energía derivado de la Primera Ley de la Termodinámica (despreciando efectos mecánicos y cambio de volumen). El punto sobre las variables indica derivada temporal de la misma y el símbolo $\nabla(\cdot) = \partial(\cdot)/\partial\mathbf{x}$ es el operador gradiente con respecto a un sistema cartesiano de referencia, $\rho_o : \Omega \rightarrow \mathbb{R}^+$ es la densidad en la configuración de referencia. Por otra parte, $\omega : \Omega \times \Upsilon \rightarrow \mathbb{R}$ es la energía interna específica, $r : \Omega \times \Upsilon \rightarrow \mathbb{R}$ es la fuente de calor específica y $\mathbf{q} : \bar{\Omega} \times \Upsilon \rightarrow \mathbb{R}^{n_{dim}}$ el vector de flujo de calor. El signo superpuesto en $\dot{\omega}$ and $\dot{\mathbf{q}}$ se utiliza para distinguir la función de su valor en las ecuaciones constitutivas (2.2) y (2.3), respectivamente.

En la ecuación (2.4), Γ_T es la parte del contorno donde la temperatura \bar{T} está prescrita, mientras en la ecuación (2.5) Γ_q , con normal unitaria saliente del contorno \mathbf{n} , es la región donde está aplicado el flujo de calor normal a) \bar{q} es el flujo de calor normal prescrito y b) q^* es el flujo de calor normal debido a los fenómenos de convección-radiación. Como es usual se suponen válidas las siguientes condiciones : $\bar{\Gamma}_T \cup \bar{\Gamma}_q = \partial\bar{\Omega}$ and $\Gamma_T \cap \Gamma_q = \emptyset$

El término q^* puede ser escrito como :

$$q^* = \begin{cases} q_{conv} & \text{in } \Gamma_c \times \Upsilon \\ q_g & \text{in } \Gamma_g \times \Upsilon, \end{cases} \quad (2.7)$$

donde q_{conv} y q_g son los flujos de calor debido a los efectos de convección-radiación donde : 1) es el ambiente y 2) entre dos cuerpos, respectivamente, de manera que $\bar{\Gamma}_c \cup \bar{\Gamma}_g = \bar{\Gamma}_q$ (ver Figura 1).

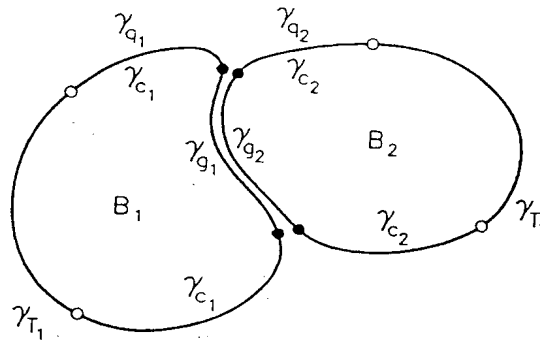


Figura 1. Descripción geométrica de dos cuerpos conductores del calor no lineales $B_{(1)}$ y $B_{(2)}$: condiciones de contorno

Se considera la ley constitutiva de Newton para q_{conv} :

$$q_{conv} = -h (T - T_{env}) , \quad (2.8)$$

donde h es el coeficiente de convección-radiación que es dependiente de la temperatura y T_{env} es la temperatura ambiente ^[1]. Cuando dos cuerpos interactúan térmicamente entre sí se asume la siguiente expresión para q_g :

$$q_{g(1)} = -h_g (T_{(1)} - T_{(2)}) , \quad (2.9.a)$$

$$q_{g(2)} = -q_{g(1)} , \quad (2.9.b)$$

donde h_g es el coeficiente de convección-radiación del medio que separa a ambos cuerpos. Este coeficiente puede ser además descompuesto en una serie de contribuciones derivadas de diferentes efectos físicos, sin embargo consideraremos aquí una expresión unificada ^[1].

En los problemas de cambio de fase, la variación de la energía interna específica se define como : ^[23,24]:

$$\dot{\omega} = c \dot{T} + L \dot{f}_{pc} \quad \text{in } \Omega \times \Upsilon , \quad (2.10)$$

donde c es la capacidad calórica específica, L es el calor latente de fusión específico y f_{pc} es la función de cambio de fase la cual será tratada en la Sección 3. Finalmente, para una descripción completa del problema, se asume la muy conocida ley de la conducción del calor de Fourier para \mathbf{q} (ecuación (2.3)):

$$\mathbf{q} = -\mathbf{k} \cdot \nabla T \quad \text{in } \Omega \times \Upsilon , \quad (2.11)$$

donde \mathbf{k} es el tensor de conductividad de segundo orden el cual puede ser dependiente de la temperatura. En el contexto isotrópico asumido en este trabajo $\mathbf{k} = k \mathbf{1}$, donde $\mathbf{1}$ es el tensor unitario y k es el coeficiente de conductividad el cual, como consecuencia de la Segunda Ley de la Termodinámica, debe cumplir $k \geq 0$.

3. MODELO MICROSCOPICO

El hierro gris es de las aleaciones más beneficiadas con la micromodelación por la gran variedad de estructuras que presenta. Esto se debe a la singularidad de superponer dos diagramas distintos: el hierro-grafito, estable y el hierro-cementita, metaestable [3], lo que complica a su vez el proceso de solidificación.

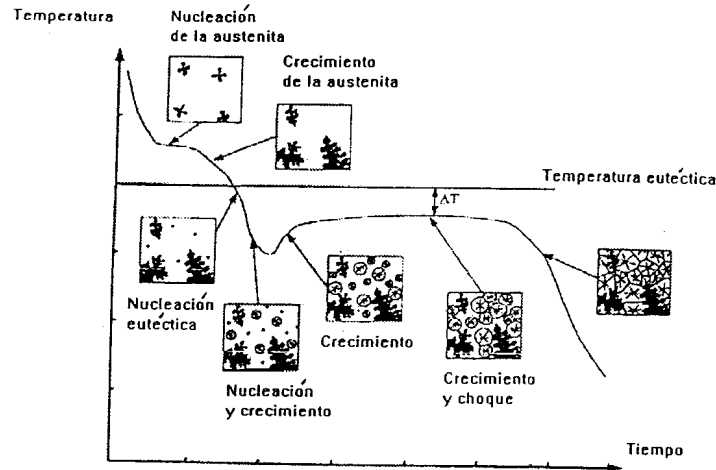


Figura 2. Evolución de la microestructura de una fundición de composición eutéctica.

La evolución de la microestructura y las diferentes etapas de la solidificación de la fundición gris se muestra en la fig [2]. La solidificación comienza tan pronto se alcanza la temperatura del líquido (T_l) correspondiente a la aleación. Durante la formación de la fase austenítica no se forman células eutécticas. La nucleación y crecimiento de las células eutécticas tiene lugar cuando la temperatura de la fundición desciende por debajo de la temperatura eutéctica (T_{eut}) y consiste en un crecimiento simultáneo y cooperativo de la austenita y el grafito y se presenta cuando el carbono equivalente (CE) del líquido restante se iguala al eutéctico.

$$CE = \%C + 0.33(\%Si + \%P), \quad (3.1)$$

Cuando hay suficiente enfriamiento el metal puede enfriarse por debajo de la temperatura eutéctica hierro-carburo y solidificar como austenita más carburo (cementita). La dificultad asociada con la nucleación de la fase grafito requiere sin embargo un sobreenfriamiento significativo por debajo de la temperatura eutéctica. La diferencia entre las temperaturas eutécticas de transformación es de $7^\circ C$ para el Fe-C puro sin embargo esta diferencia puede aumentar o decrecer en presencia de ciertos elementos de aleación [3-5]. Grafitizadores como el Si incrementan esta diferencia en cambio el Cr la disminuye favoreciendo la formación de carburo. El calor latente liberado durante la solidificación provoca un aumento de la temperatura de la fundición (recalescencia), después de lo cual la nucleación cesa y la solidificación apartir de entonces tiene lugar sólo por el crecimiento de los granos.

Las curvas de enfriamiento constituyen una valiosa herramienta para el seguimiento del fenómeno de la solidificación. Como se observa en los gráficos es posible predecir la estructura del hierro por medio del análisis de las características de las curvas de enfriamiento.

Las observaciones experimentales establecen que durante el enfriamiento del hierro hipoeutéctico se forma una estructura del tipo equiaxial, excepto en la región más próxima a la pared del molde donde la estructura es del tipo columnar [6]. Despreciando esta pequeña región la fracción sólida puede ser calculada por medio de la expresión :

$$f_s(t) = N(t)4/3\pi R^3(t), \quad (3.2)$$

Para determinar la fracción sólida ($f_s(t) = 1 - f_{pc}$) debemos relacionar la densidad $N(t)$ y la velocidad de crecimiento $dR(t)/dt$ de los núcleos con el sobreenfriamiento $\Delta T = T_{eut} - T$.

La ecuación (3.2) considera que los granos son esféricos durante todo el proceso de solidificación, lo cual es válido hasta tanto los núcleos no comiencen a chocar unos con otros. Es por eso que hemos considerado la ecuación de Johnson-Mehl (6) que tiene en cuenta este efecto.

$$f_s(t) = 1 - \exp(-N(t)4/3\pi R^3(t)). \quad (3.3)$$

Solidificación de la austenita

Clyne y Kurz estudiaron la cinética de la solidificación austenítica y determinaron que debido a la rápida difusión del carbono en el hierro la precipitación de la austenita tiene lugar sin obstáculo alguno, por lo tanto la fracción sólida en este caso puede determinarse directamente por la regla inversa de la palanca :

$$f_s = (1 - k')^{-1}(T - T_l)/(T - T_{\gamma 0}), \quad (3.4)$$

$$k' = C_s/C_l = (2.10 - 0.2165\%Si)/(4.26 - 0.3167\%Si), \quad (3.5)$$

$$T_l(^{\circ}C) = 1569.0 - 97.3(\%C + 0.25\%Si), \quad (3.6)$$

$$T_{\gamma 0}(^{\circ}C) = 1618.0 - 15.0332\%Si, \quad (3.7)$$

donde k' es la relación entre las pendientes de las curvas del líquido y el sólido. T_l - temperatura del líquido. $T_{\gamma 0}$ - temperatura donde intersectan las curvas del líquido y el sólido.

Solidificación eutéctica

En el caso de la solidificación eutéctica la fracción sólida se determina según (3.2) y (3.3) una vez se establezcan las leyes de nucleación y crecimiento. Algunos autores [7] consideran que para ciertas aleaciones y bajo determinadas condiciones de enfriamiento la nucleación instantánea describe de manera adecuada la nucleación equiaxial eutéctica. En este caso la densidad de grano se asume constante tan pronto como la temperatura alcanza el valor crítico de nucleación. Sin embargo otros estudios experimentales demuestran la presencia de más de un tipo de nucleación causado por la gran variedad de sustratos reconocidos (óxidos, sulfuros, carburos y nitruros). Debido a la complejidad de este fenómeno, Olfield desarrolló un método empírico para relacionar la densidad de los granos con el sobreenfriamiento :

$$N_{eut} = A_{eut}(\Delta T)^{n_{eut}}, \quad (3.8)$$

donde $A_{eut} = 10^{(-25+4.6CE+4.06\%inoculante)}(mm/s^{\circ}C^2)$

$$n_{eut} = 12.56 - 2.15CE$$

En el presente trabajo consideramos la misma ley de nucleación para los eutécticos austenita-grafito y austenita-carburo de hierro. Las temperaturas eutécticas para una aleación hipoeutécticas se determinan [8], por las expresiones siguientes :

$$T_C(^{\circ}C) = 1135.06 + 13.89\%Si - 2.05\%Si^2, \quad (3.9)$$

$$T_{Fe_3C}(^{\circ}C) = 1138.2 - 6.93(2.5\%C + \%Si) - 1.717(\%Si + 2.5\%P)^2, \quad (3.10)$$

Por su parte la cinética del crecimiento de los granos sigue un comportamiento de tipo exponencial similar al de la nucleación :

$$dR/dt = B_{eut}(\Delta T)^{m_{eut}}, \quad (3.11)$$

donde $B_c = 2.510^{-5} - 34.510^{-5}(mm/s^{\circ}C^2)$

$$m_c = 2$$

$$B_{Fe_3C} = 3010^{-3}(mm/s^{\circ}C^2)$$

$$m_{Fe_3C} = 2$$

Predicción de propiedades

Las propiedades mecánicas de la fundición dependen de la composición química, el tamaño y forma de las láminas de grafito y de la relación entre las fracciones de las fases de ferrita y perlita (transformación en estado sólido no tratada en este trabajo). La resistencia a la tracción última de la fundición gris σ_f se determina según el criterio de fractura de Griffith :

$$\sigma_f = K/(C_{max})^{1/2}, \quad (3.12)$$

donde C_{max} es el tamaño máximo de las láminas de grafito y K es una constante que depende de la composición química de la fundición. Para una fundición gris de 2 pct Si y 3.2 pct C $K=146.7 (MPamm^{1/2})$. El tamaño máximo de las láminas de grafito es igual al tamaño máximo de las células eutécticas puesto que se asume que las láminas no rebasan los límites de esta última.

La dureza fué evaluada por medio de la resistencia a la tracción última según Bates [8].

$$H = 0.028\sigma_f \exp(0.8228CE). \quad (3.13)$$

4. PROCEDIMIENTO NUMERICO

Se utilizó el método de los elementos finitos para resolver la ecuación del flujo de calor con cambio de fase donde la temperatura es la única variable independiente del problema. Una descripción de la metodología empleada viene detallada en la tesis doctoral de D Celentano [1]. La función de cambio de fase (f_{pc}) aparece como la variable de acoplamiento entre ambos modelos la cual depende de la temperatura. La solución numérica requiere por tanto un "acoplamiento fuerte" que consiste en aproximar la solución de forma iterativa hasta tanto se cumpla globalmente la condición del balance de energía.

5. EJEMPLO NUMERICO

Hemos considerado el ejemplo del enfriamiento unidireccional de una lámina de 2" (5.08 cm) de longitud aislada en sus superficies laterales y en uno de sus extremos, en el otro se establecen las condiciones de enfriamiento a través del coeficiente de transferencia de calor h ($W/m^2\text{°C}$) y la temperatura externa T_{ext} . Más detalles acerca del modelo aparecen en [9]. Las propiedades físicas utilizadas para la fundición fueron las siguientes :

Conductividad térmica ($W/m\text{°C}$)

fase sólida 38 fase líquida 20

Calor específico ($J/Kg\text{°C}$)

fase sólida 830 fase líquida 750

Calor latente (J/Kg)

austenita 263.10^3 grafito eutéctico 233.10^3 carburo de hierro eutéctico 213.10^3

Densidad 7230.0 (Kg/m^3)

Temperatura de vaciado $T_l + 40(\text{°C})$

Se realizó un estudio de los efectos que causan las distintas variables (composición química y condiciones externas de enfriamiento) sobre la microestructura así como la transición del hierro blanco al hierro gris (ver tablas 1 y 2). Los resultados concuerdan con los reportes de simulación y experimentos hechos por Krivanek [9]. La fig [3] muestra las curvas de enfriamiento para la variante de la fundición de 3.2 % C y 2.0 % Si, coeficiente de transferencia $h=2500 W/m^2\text{°C}$ y $T_{ext} = 350 \text{°C}$. Las propiedades mecánicas fueron evaluadas para el ejemplo de una fundición de composición igual a la anterior sin embargo las condiciones externas de enfriamiento en este caso se tomaron variables en sentido decreciente con la temperatura y evaluadas de manera tal que se aproximara a las condiciones reales de enfriamiento de una pieza en un molde de arena (ver fig [4]).

6. CONCLUSIONES

Se implementó un modelo en elementos finitos para la simulación macro-microscópica de la solidificación de la fundición gris con la ayuda del cual podemos determinar :

1. Las curvas de enfriamiento.
2. La distribución de la austenita el grafito y la cementita dentro de la fundición.
3. El tamaño y concentración de las células eutécticas de grafito y cementita.
4. La transición del hierro blanco al gris.
5. Las propiedades mecánicas (resistencia a la tracción límite y dureza) de la fundición.
6. La influencia de determinadas variables en la microestructura y la propiedades finales de la fundición.

7. AGRADECIMIENTOS

El primer autor agradece al gobierno de España por la beca MUTIS y todos a su vez agradecemos al profesor Jordi Tartera por la ayuda brindada.

7. REFERENCIAS

- 1 Diego Celentano, "Un Modelo Termomecánico para Problemas de Solidificación de Metales", *Tesis Doctoral*, Universidad Politécnica de Cataluña, Barcelona, España, Mayo de 1994.
- 2 Rappaz M. "Modelling of Microstructure Formation in Solidification Processes", *International Materials Reviews*, 1989, Vol. 34, No. 3, 93-123.
- 3 Jordi Tartera. "Mecanismo de la inoculación de las fundiciones" *Revista Colada vol 11, num 12, 1978*.
- 4 J. F. Janowak and R. B. Gundlach. "Fundiciones grises aleadas (1)" *Revista Fundición, marzo-abril, 1987 p 12*.
- 5 J. F. Janowak and R. B. Gundlach. "Fundiciones grises aleadas (2)" *Revista Fundición, mayo-junio, 1987 p 19*.
- 6 Emilio Pérez, Diego Celentano y Sergio Oller, "Modelación de la Solidificación y Enfriamiento de la Fundición (Estado del Arte)", *Revista Fundidores, España, Marzo 1995*.
- 7 D. M. Stefanescu and C. S. Kanetkar. "Modeling microstructural evolution of eutectic cast iron and of the gray/white transition" *AFS Transaction, vol 68, 1987 p 139*.
- 8 D. D. Goettsch and J. A. Dantzig. "Modeling microstructure development in gray cast irons" *Metallurgical and Materials Transaction, vol 25A, 1994 p 1063*.
- 9 R. A. Krivanek and C. E. Mobley. "A computer model for the solidification of cast-iron chill tests" *AFS Transaction, vol 85, 1984 p 311*.
- 10 Celentano D., Oñate E. and Oller S., "A Temperature-Based Formulation for Finite Element Analysis of Generalized Phase-Change Problems", *Int. Jour. Num. Meth. Engng.*, Vol. 37, 3441-3465 (1994).
- 11 Celentano D. and Pérez E. "A Phase-Change Formulation Including General Latent Heat Effects", submitted to *Int. J. Num. Meth. Heat Fluid Flow*.
- 12 E. Fras and W. Kapturkiewicz "Macro and micro modeling of the solidification kinetics of castings" *AFS Transaction, vol 48, 1992 p 583*.

h elem.	400.0	2000.0	4000.0	20000.0
1	g	g	g	g
2	g	g	g	g
3	g	g	g	g
4	g	g	g	g
5	g	g	g	w
6	g	g	w	w
7	g	g	w	w
8	g	w	w	w

Tabla 1. Transición del hierro blanco al gris como función del coeficiente de transferencia de calor h ($w/m^2 \text{ } ^\circ C$).

%Si elem.	1.6	1.8	2.0	2.4
1	g	g	g	g
2	g	g	g	g
3	g	g	g	g
4	g	g	g	g
5	w	g	g	w
6	w	w	w	w
7	w	w	w	w
8	w	w	w	w

Tabla 2. Transición del hierro blanco al gris como función del contenido de silicio (%).

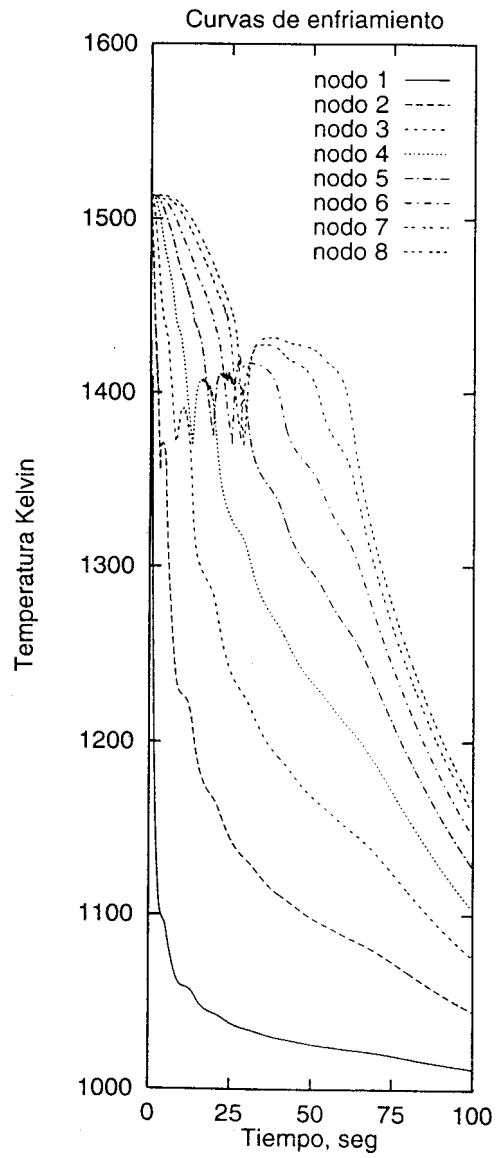


Figura 3.

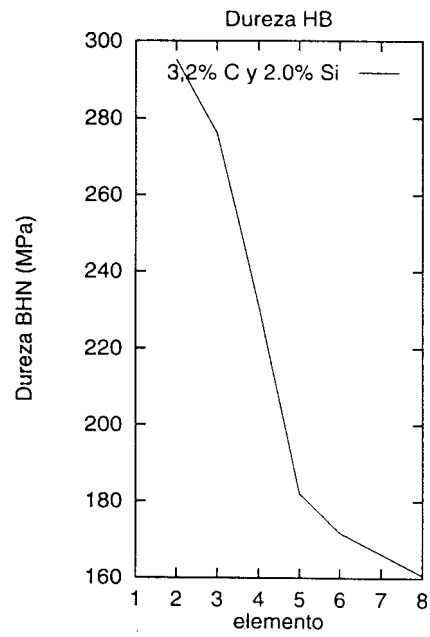


Figura 4.