

# Simulación de la micromecánica en la solidificación de una fundición de grafito esferoidal

Patricia M. Dardati

Departamento de Ingeniería Industrial  
Facultad Regional Córdoba  
Universidad Tecnológica Nacional  
Maestro M. López esquina Cruz Roja Argentina, Oficina 33  
50162AA Córdoba, Argentina  
Tel.: 54-351-468 42 15 interno 144; Fax: 54-351-468 18 23  
e-mail: pdardati@industrial.frc.utn.edu.ar

Luis A. Godoy, Germán A. Cervetto y Pedro J. Paguaga

Facultad de Ciencias Exactas, Físicas y Naturales  
Universidad Nacional de Córdoba  
Casilla de correo 916  
5000 Córdoba, Argentina  
Tel./Fax: 54-351-433 41 44  
e-mail: lgodoy@com.uncor.edu

## Resumen

Este trabajo presenta una simulación computacional y resultados de la evolución de la microestructura durante la solidificación de una fundición de grafito esferoidal, obtenidos mediante autómatas celulares. La microestructura se define en un elemento de volumen representativo y su evolución está dada por modelos de nucleación y de crecimiento propuestos por la teoría uninodular, que se escriben aquí en forma de reglas. Las reglas se operan en cada celda del autómata para determinar un vector de estado. La evolución permite visualizar de manera simulada el proceso de solidificación a medida que desciende la temperatura, y cómo se extiende la parte sólida alrededor de núcleos de grafito.

**Palabras clave:** *autómata celular, fundición dúctil, micromecánica, solidificación.*

## MICROMECHANICS SIMULATION DURING THE SOLIDIFICATION OF SG CAST-IRON

## Summary

This paper reports on a computational simulation and results of the evolution of a microstructure during the solidification process of spheroidal graphite cast iron, which is obtained by cellular automata. The microstructure is defined in a representative volume element and its evolution is given by nucleation and growth laws given by the uninodular theory, which are here implemented in the form of rules. Such rules are applied at each cell of the automata to compute a vector state. The simulation allows visualizing the solidification process as temperature decreases, and the way the solid part grows as an envelope of the graphite nuclei. Results are shown of the influence of the nucleation parameter and of the initial distribution of nuclei.

**Keywords:** *solidification, cast iron, cellular automata, micromechanics.*

## INTRODUCCIÓN

Uno de los desafíos actuales en la mecánica computacional es la simulación de la respuesta de sólidos considerando dos escalas de análisis. Desde el punto de vista de la ingeniería mecánica, el acoplamiento más importante ocurre entre la macromecánica (en el nivel de piezas mecánicas) y la micromecánica (en la que se forman características constitutivas del material). Éste es aún un campo incipiente, pero se espera que tenga un impacto importante en la industria porque contribuirá a desarrollar materiales adecuados para una determinada función.

En particular son de interés en este trabajo los problemas de solidificación equiaxial de una fundición de grafito esferoidal (también conocida como fundición nodular o fundición dúctil) de composición eutéctica. En trabajos previos los autores y otros investigadores han considerado la macromecánica mediante un problema de transferencia de calor, en el que la micromecánica se toma en cuenta usando un modelo fenomenológico que se aplica en los puntos de integración de Gauss<sup>4,5</sup>. Este tipo de enfoque considera la respuesta promedio de la micromecánica y esa respuesta se lleva a la macromecánica, nivel en el cual se plantea y resuelve la ecuación de conducción del calor que puede expresarse como<sup>17</sup>

$$\rho c \dot{T} + \rho L \dot{f}_{pc} = \nabla(k \nabla T)$$

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.

Cuando el análisis es puramente macroscópico, el cambio de fase  $f_{pc}$  es una función explícita de la temperatura, siendo esta última la única variable de estado independiente del problema. Estos tipos de análisis no pueden predecir parámetros microestructurales determinantes de las propiedades mecánicas del material tales como tamaño de grano, tipo y porcentajes de microestructura, que sí pueden determinarse a través de la formulación de un modelo microscópico. Los avances en algoritmos y computadoras sumados a necesidades de la industria motivan en la actualidad llevar a cabo simulaciones del comportamiento en el nivel de micromecánica, como manera de seguir en detalle la evolución de la microestructura. A escala micromecánica la determinación de  $f_{pc}$  se realiza esencialmente sobre la base de leyes de nucleación y crecimiento de los granos. Cuando el tratamiento del problema se basa en la solución de ecuaciones continuas, 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<sup>15,16</sup>, que se ha empleado en algunos problemas de micromecánica de materiales<sup>1,2,8</sup>. Los primeros trabajos de solidificación en esa dirección son los de Gandin y Rappaz<sup>10,6</sup> y Stefanescu<sup>9,12</sup>. 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.

El objetivo de esta investigación ha sido el desarrollo de un modelo de micromecánica para solidificación de grafito esferoidal usando autómatas celulares. La siguiente sección describe el problema físico de solidificación y las bases de la teoría uninodular que se ha empleado en esta instancia. En las secciones posteriores 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 última sección junto con estudios acerca de la sensibilidad del estado al final de la solidificación.

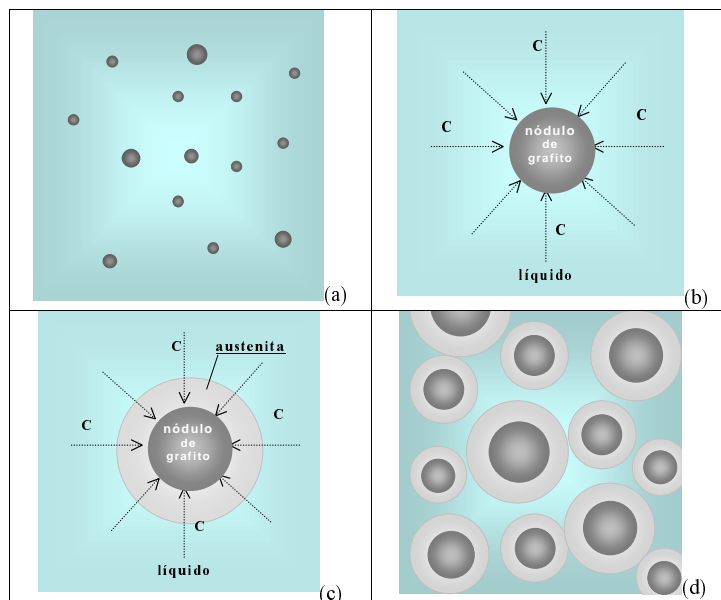
## MODELO MICROESTRUCTURAL DE LA FUNDICIÓN ESFEROIDAL

La fundición de grafito esferoidal (conocida en inglés como “SG cast iron”) es de gran importancia en la industria metalúrgica y en diversas áreas de la ingeniería. La forma esférica adoptada por el grafito le confiere muy buenas propiedades mecánicas a este tipo de fundición, lo que ha permitido reemplazar al acero fundido y al forjado en numerosas aplicaciones.

Actualmente prevalecen principalmente dos teorías explicativas para el proceso de solidificación de esta fundición: la teoría uninodular<sup>11</sup> que propone que el crecimiento de la austenita ocurre en forma de una capa esférica envolviendo los nódulos de grafito, mientras que la teoría multinodular<sup>3,4</sup> plantea la nucleación independiente de la austenita y su crecimiento dendrítico. En este trabajo se simula el proceso de solidificación equiaxial de una fundición nodular de composición eutéctica mediante la técnica de autómatas celulares siguiendo la teoría uninodular.

Según la teoría uninodular el proceso de solidificación puede resumirse mediante los siguientes postulados<sup>13</sup>:

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



**Figura 1.** Esquema del crecimiento de nódulos de grafito según la teoría uninodular: a) nucleación del carbono; b) crecimiento de nódulos de grafito por deposición del carbono; c) austenita rodea nódulos de grafito; d) etapa de solidificación

En este trabajo se analiza la solidificación de una fundición de composición eutéctica, es decir, que no se considera la aparición de austenita ni de grafito primario. Como efecto adicional 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, cuyas líneas de líquidus, sólidus y temperatura de equilibrio eutéctica están definidas por funciones que dependen del contenido de silicio (Si) y de carbono (C) en la fundición, como se especifica en el Apéndice.

Hay dos aspectos cruciales en el modelo que son: la nucleación del grafito y el crecimiento de los nódulos de grafito y de su envoltura de austenita. Para la nucleación del grafito se utiliza una ley de nucleación continua<sup>11</sup>

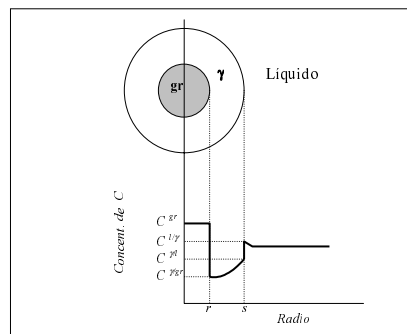
$$N = A\Delta T \quad (1)$$

donde  $N$  es la densidad de nucleación;  $A$  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 recalentamiento, fenómeno que ocurre si la velocidad de generación del calor latente por el cambio de fase es mayor a la de extracción de calor del elemento que solidifica.

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<sup>11</sup> en la forma

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

donde el punto sobre las variables indica derivada temporal;  $r$  es el radio del nódulo de grafito;  $s$  el radio de la cápsula de austenita (Figura 2);  $\rho_{\gamma}$  y  $\rho_{gr}$  son las densidades de la austenita y el grafito, respectivamente;  $D_c^{\gamma}$  es el coeficiente de difusión del carbono en la austenita; y  $C^{\gamma/l}$ ,  $C^{l/\gamma}$  y  $C^{\gamma/gr}$  las concentraciones de carbono del diagrama de fase que se indican en el Apéndice.



**Figura 2.** Distribución de la concentración de carbono en el nódulo de grafito y la cápsula 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.*<sup>11</sup>

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

Siguiendo las referencias 11 y 14, en las ecuaciones (2) y (3), se adopta un valor constante para la relación  $\frac{s}{r} = 2,3809$ .

Cuando las expresiones (1) y (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. 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.

## MODELO DE AUTÓMATA CELULAR

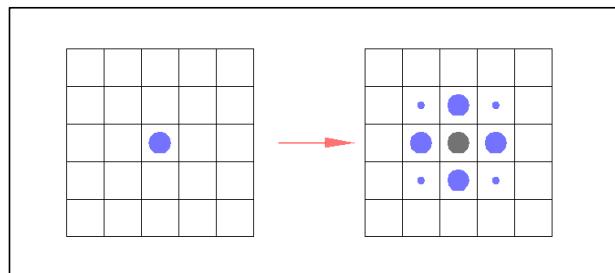
Para modelar la solidificación de una aleación eutéctica de fundición nodular se usó la técnica de autómatas celulares<sup>15,16</sup>, generalmente abreviada como AC. En un AC el dominio en estudio se discretiza usando una grilla regular y en cada celda de la grilla se define un vector de estado. A 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 3, con algunas modificaciones de ponderaciones que se explicitan más adelante.



**Figura 3.** Vecindad de Moore utilizada en este trabajo

*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  $\mathbf{W}$  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 3.

Un aspecto original del modelo que se presenta reside en trabajar con dos grillas acopladas de autómatas, una matriz  $\mathbf{W}$  para la evolución de nódulos de grafito y otra matriz  $\mathbf{M}$  para la evolución de la austenita. Como se indica en la Figura 4, las celdas de  $\mathbf{M}$  coinciden topológicamente con las celdas de  $\mathbf{W}$ . Las celdas de  $\mathbf{M}$  permiten visualizar la evolución de las esferas de austenita y los radios de dichas esferas se guardan en las celdas correspondientes de  $R_a(i, j)$ .

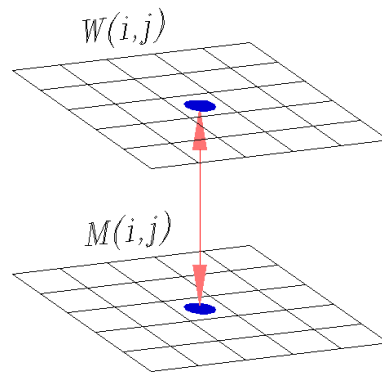


Figura 4. Acoplamiento de grillas en un único modelo

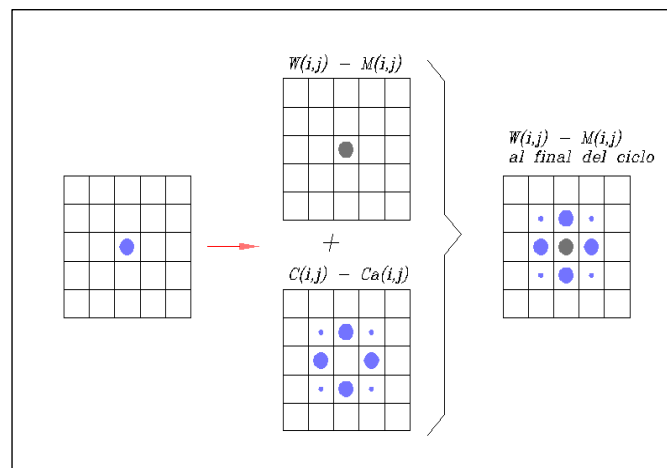
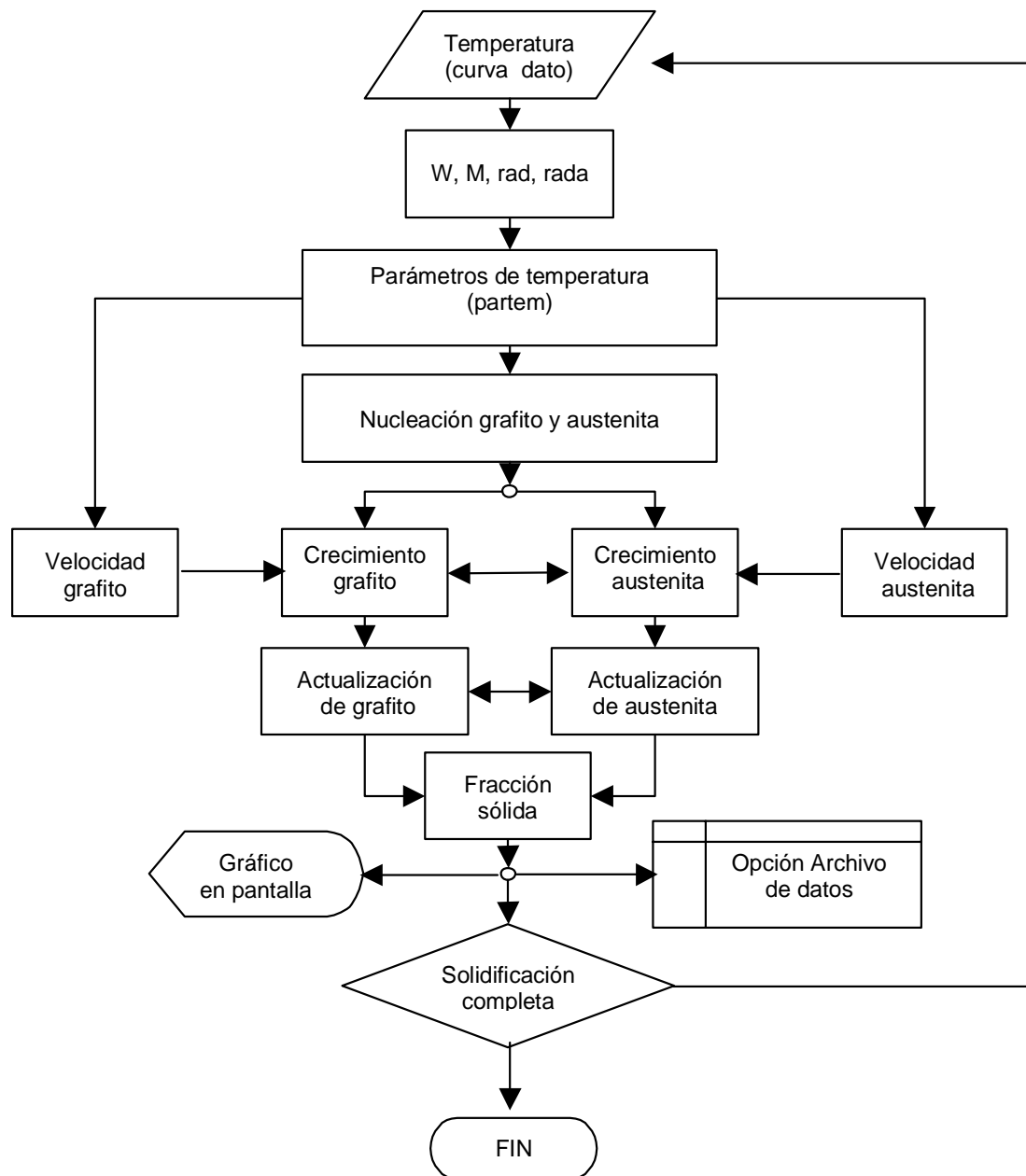


Figura 5. Esquema de asignación de incrementos de radio a las celdas vecinas

En los autómatas celulares es preciso cuidar que la configuración resultante no dependa del sentido del 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 5. El mismo procedimiento se utiliza para el crecimiento de las esferas de austenita y para la matriz  $\mathbf{M}$  se genera una matriz auxiliar  $C_a$ .



**Figura 6.** Diagrama de flujo de cálculo de la micromecánica. Rad refiere a  $R_g(i, j)$ ; Rada refiere a  $R_a(i, j)$

### ALGORITMO DE AUTÓMATA CELULAR

La Figura 6 muestra el diagrama de flujo utilizado para el cálculo. 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:

### *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: a) curva de temperatura, que proviene del problema macromecánico; b) intervalo de tiempo; c) concentraciones de carbono y silicio de la aleación; d) densidad del grafito y de la austenita; y e) coeficientes de difusión del carbono en el líquido y en la austenita.

### *Nucleación de grafito*

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

- Se verifica si hay recalcancia 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  $1 \mu\text{m}$ .

### *Velocidad de crecimiento del radio de grafito*

Esta subrutina se encuentra dentro de la subrutina de crecimiento, debido a que para cada celda (posición y radio) se calcula su correspondiente velocidad de crecimiento, lo que origina un incremento de radio  $\Delta r$ . Para este modelo<sup>11</sup> se considera que la velocidad de crecimiento del grafito es isotrópica y dada por la ecuación (2).

### *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  $\mathbf{W}$ , 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 de 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 5. Al finalizar con el recorrido de la matriz  $\mathbf{W}$ , esta se actualiza mediante la suma  $W = W + C_g$ .

#### *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  $\mathbf{W}$  sin calcular nuevos incrementos de radio, al sólo 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.

#### *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.

#### *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 expresión (3).

#### *Crecimiento de la austenita*

Para la austenita se utiliza un algoritmo de autómatas celulares similar al descrito para el grafito. Los incrementos de radio de austenita  $\Delta s$  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  $\mathbf{M}$ , tiene una componente más que su homóloga  $\mathbf{W}$  (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  $\mathbf{M}$  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.

#### *Actualización de la austenita*

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

#### *Representación gráfica*

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 representarse punto por punto debido a la representación de los granos de distintos colores y a la interferencia anteriormente mencionada.

### *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  $W(i, j) \neq 0$  o  $M(i, j) \neq 0$  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  $M(i, j, 1) \neq 0$ , 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 omiten 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 ó 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.

## 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  $w_c = 5 \mu\text{m}$ . 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  $1 \mu\text{m}$  y  $1,2 \mu\text{m}$ , respectivamente. Se utilizó una curva de enfriamiento que se muestra en la Figura 7, obtenida mediante un modelo determinístico continuo<sup>5</sup>. 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.

En la Figura 8 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. En la Figura 9 puede realizarse una comparación cualitativa entre una micrografía y la microestructura final obtenida mediante el cálculo. La micrografía extraída de Borrajo<sup>18</sup> se seleccionó tomando como base a la densidad final de nódulos que en el cálculo resultó de  $168 \text{ nod/mm}^2$  siendo la de la micrografía de  $187 \text{ nod/mm}^2$ . 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.

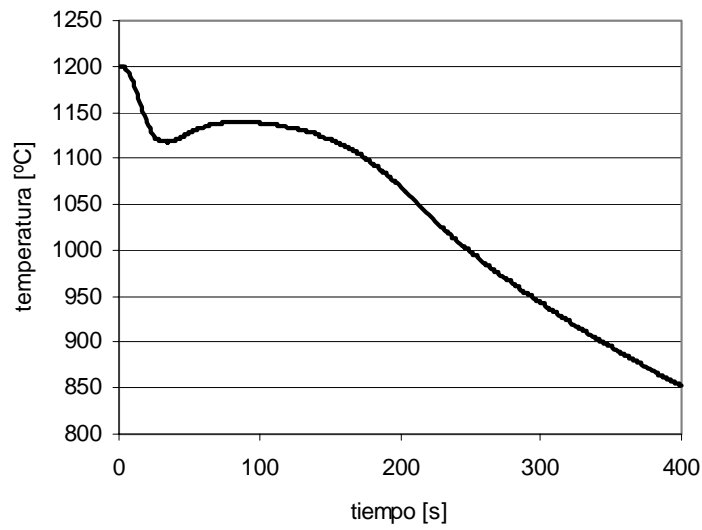


Figura 7. Curva de enfriamiento (extraída de la referencia 5)

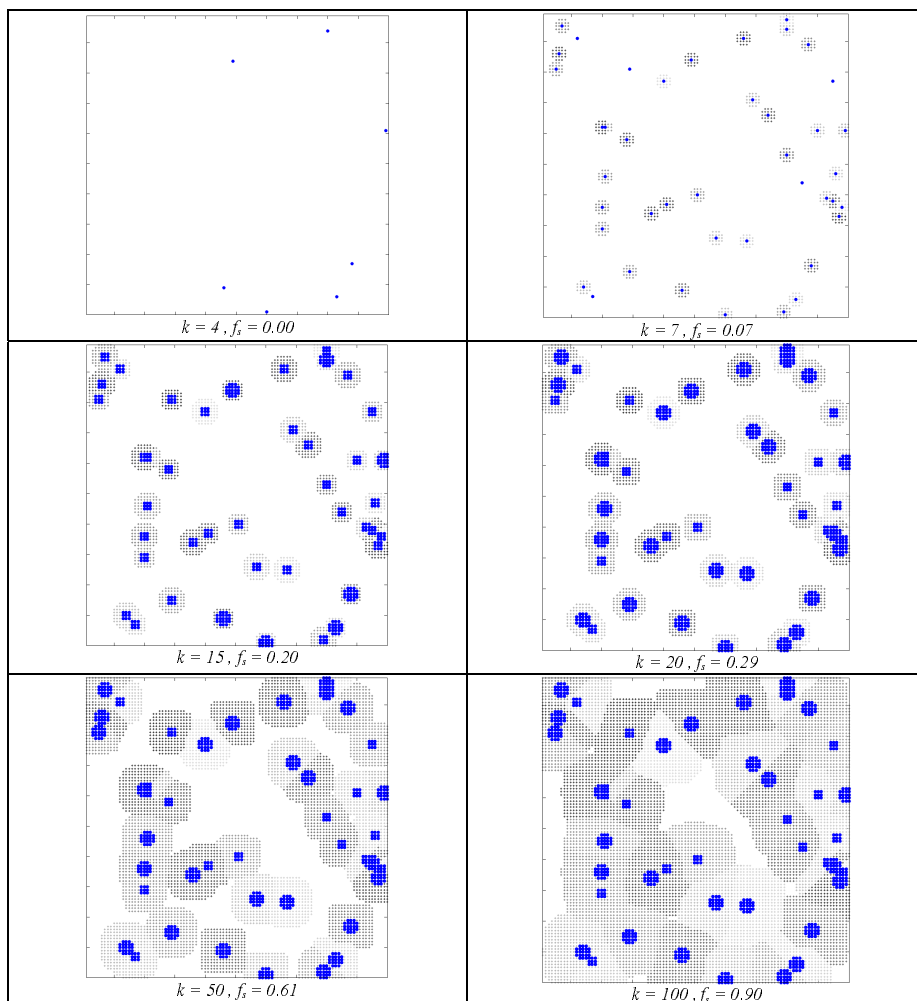
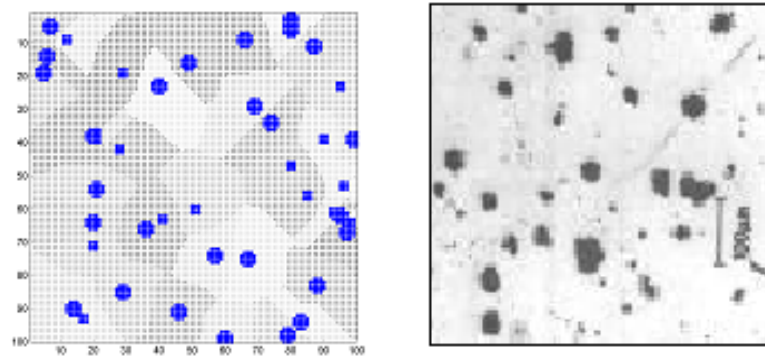
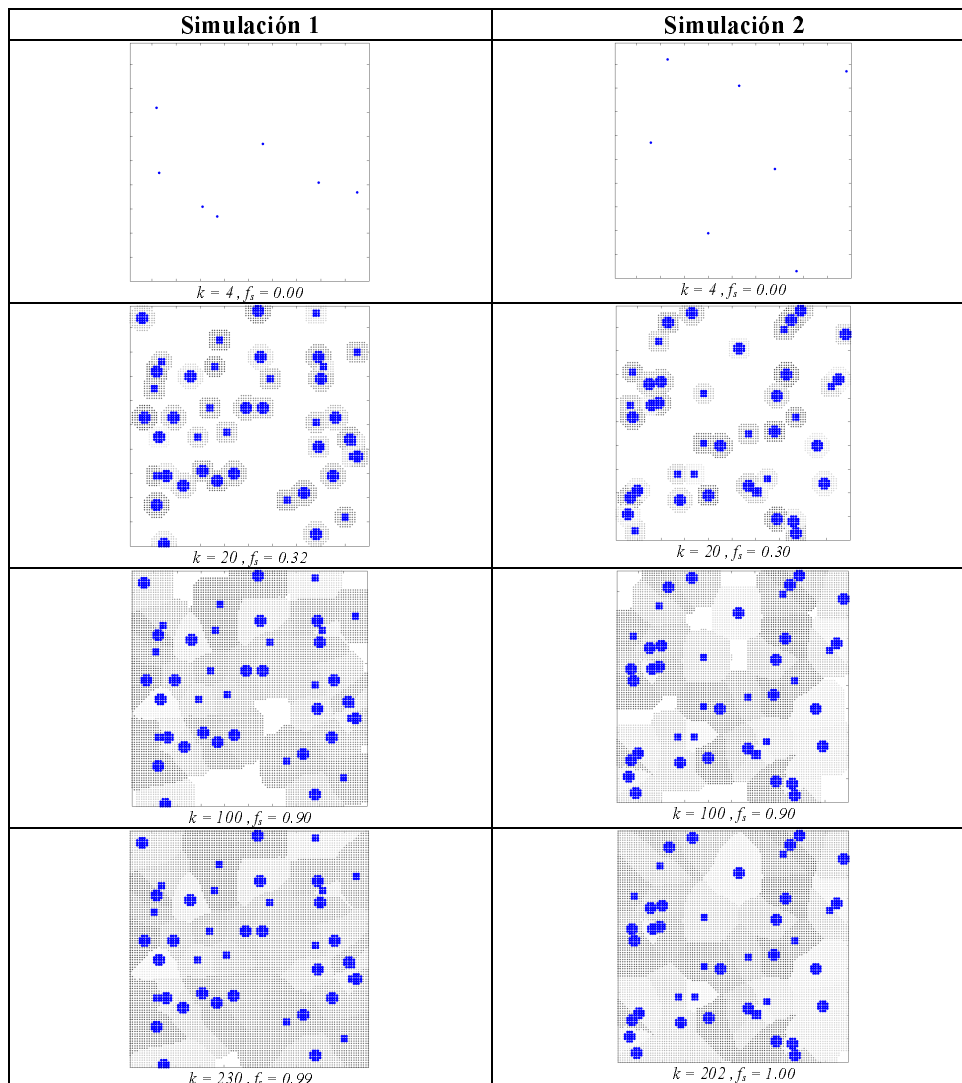


Figura 8. Evolución de la microestructura considerando  $A=390$ , para los intervalos 5, 7, 15, 20, 50 y 100



**Figura 9.** Comparación cualitativa de la microestructura obtenida mediante AC y la micrografía obtenida por J. Borrajo en la referencia 18



**Figura 10.** Evolución de la microestructura considerando los mismos parámetros de nucleación y crecimiento pero con nucleación inicial en lugares diferentes

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 10 se muestran 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 tres simulaciones de las Figuras 8 y 10, 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. En la Figura 11 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<sup>18</sup>.

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

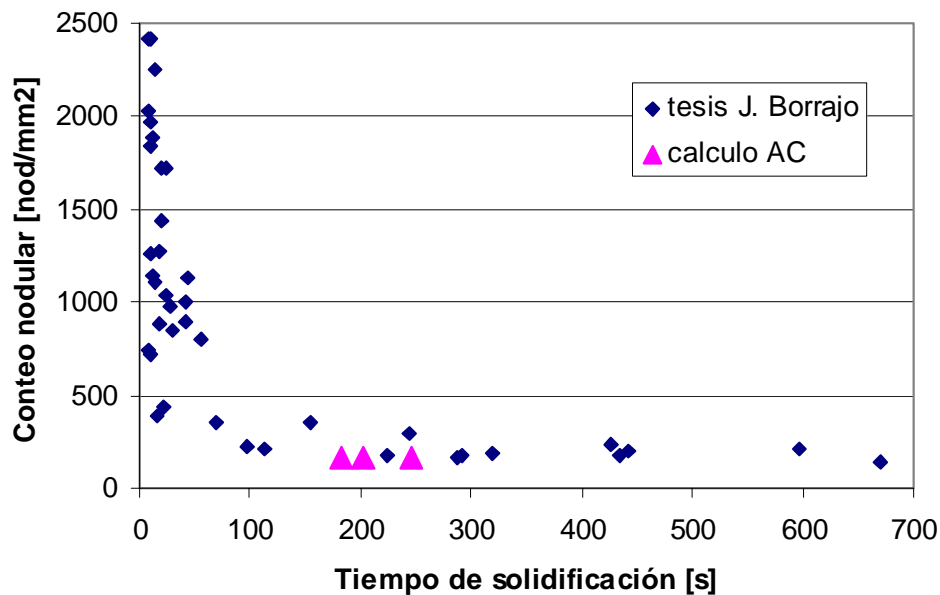
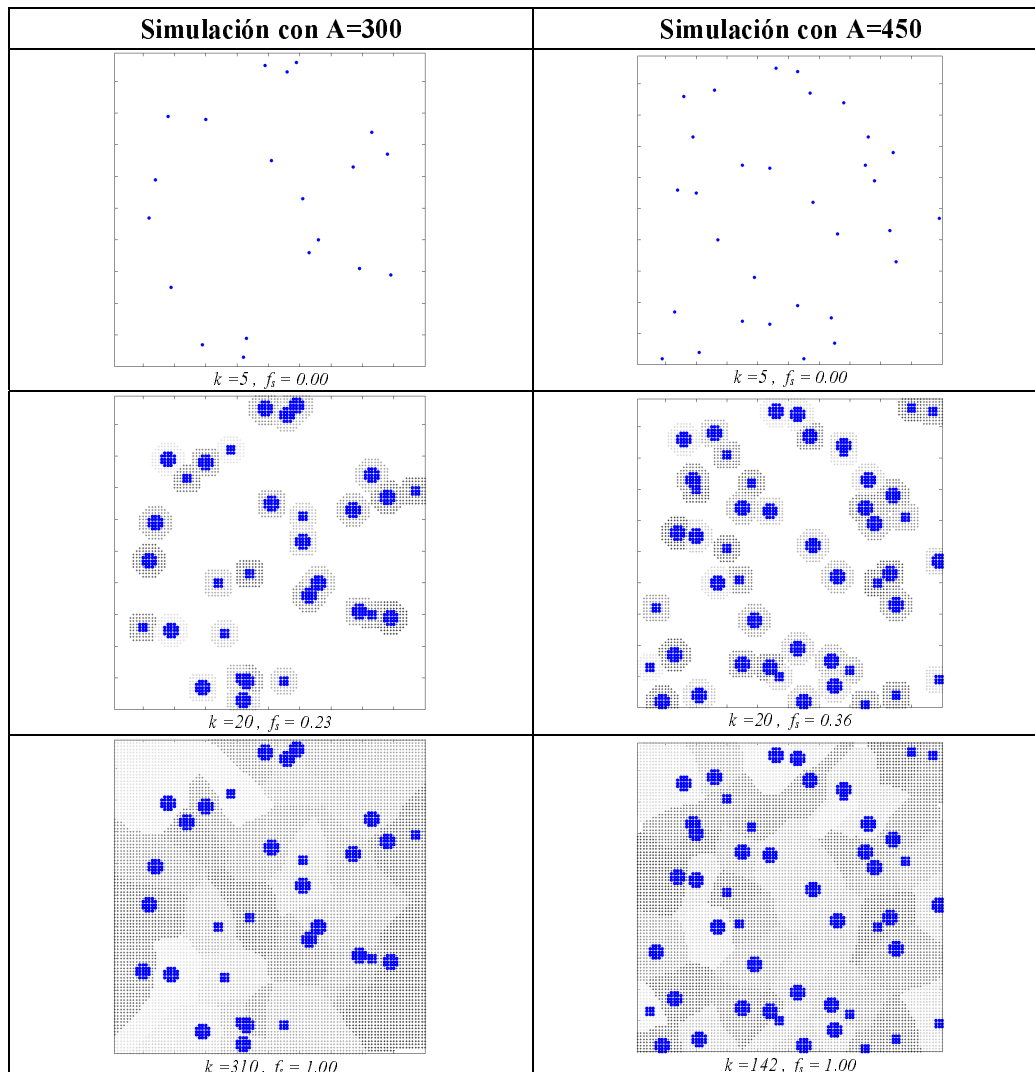


Figura 11. Conteo nodular según el tiempo de solidificación (datos experimentales<sup>18</sup>)

En la Figura 12 se presentan en paralelo los resultados de dos cálculos realizados con diferentes valores del parámetro de nucleación  $A$  usado en la ecuación (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 12.** Influencia del parámetro de nucleación  $A$  sobre la evolución de la microestructura

## CONCLUSIONES

En este trabajo se ha implementado un modelo para simular la solidificación equiaxial de la fundición de grafito esferoidal, usando una técnica de autómatas celulares. El modelo físico adoptado es el de Su *et al.*<sup>11</sup>, 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 micromecánica 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, en este trabajo 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.

Trabajos futuros en esta área prevén modelar otras posibilidades físicas, en las cuales la austenita evolucione en forma dendrítica y de manera independiente del grafito. Estos modelos de micromecánica evolutiva pueden acoplarse a la macromecánica térmica a fin de resolver el problema micro-macro acoplado.

## AGRADECIMIENTOS

Este trabajo es parte de un proyecto mayor que fue subsidiado por la Agencia Córdoba Ciencia y por el CONICET. Durante este periodo, P. M. Dardati tuvo una beca doctoral de la Universidad Tecnológica Nacional y L.A. Godoy trabajó como investigador principal de CONICET. Los autores agradecen el apoyo recibido de D. Celentano y R. Boeri.

## REFERENCIAS

- 1 D. Bentz, P. Coveney, E. Garboczi, M. Kleyn y P. Stutzman, "Cellular automaton simulations of cement hydration and microstructure development", *Modelling Simul. Mater. Sci. Engng.*, Vol. **2**, pp. 783–808, (1994).
- 2 D. Bentz, "Three-dimensional computer simulation of portland cement hydration and microstructure development", *Journal Am. Ceram. Soc.*, Vol. **80**, N° 1, pp. 3–21, (1997).
- 3 R. Boeri, *The solidification of ductile cast iron*, Tesis doctoral, University of British Columbia, Canadá, (1989).
- 4 P. Dardati, D. Celentano, L.A. Godoy y R. Boeri, "Simulación numérica del proceso de solidificación de la fundición dúctil", *Mecánica Computacional*, Vol. **21**, pp. 2855–2874, en prensa, (2006, en prensa).
- 5 P. Dardati, D. Celentano, L.A. Godoy y R. Boeri, "Numerical simulation of solidification processes of spheroidal-graphite cast iron", *Journal of Computational Methods in Science and Engineering*, (2004).
- 6 Ch. Gandin y M. Rappaz, "A coupled finite element-cellular automaton model for the prediction of dendritic grain structures in solidification processes", *Acta Metall. Mater.*, Vol. **42**, N° 7, pp. 2233–2246, (1994).
- 7 R.W. Heine, "The Fe-C-Si solidification diagram for cast irons", *AFS Transactions*, Vol. **86-71** pp. 391–02, (1986).
- 8 P. Matic y A. Geltmacher, "A cellular automaton-based technique for modeling mososcale damage evolution", *Computational Material Science*, Vol. **20**, pp. 120–141, (2001).

- 9 H. Pang y D.M. Stefanescu, "Stochastic modeling of dendritic and eutectic grain structure evolution during solidification", *Solidification Science and Processing*, pp. 149–156, (1996).
- 10 M. Rappaz y Ch.A. Gandin, "Probabilistic modelling of microstructure formation in solidification processes", *Acta Metall. Mater.*, Vol. **41**, N° 2, pp. 345–360, (1993).
- 11 K. Su, I. Ohnaka, I. Yamauchi y T. Fukusako, "Computer simulation of solidification of nodular cast iron", *Proceedings of the Third International Symposium on the Metallurgy of Cast Iron*, Estocolmo, agosto 29–31, pp. 181–189, (1984).
- 12 D. Stefanescu, "Methodologies for modeling of solidification microstructure and their capabilities", *ISIJ Int.*, Vol. **35**, N° 6, pp. 637–650, (1995).
- 13 C. Van de Velde, "A new approach to the solidification of cast iron", <http://members.tripod.lycos.nl/cvdv>
- 14 S. Wetterfall, H. Fredriksson y M. Hillert, "Solidification process of nodular iron", *Journal Iron Steel Institute*, Vol. **210**, parte I, pp. 323–333, (1972).
- 15 S. Wolfram, "Theory and applications of cellular automata", *World Scientific*, Singapore, (1986).
- 16 S. Wolfram, "*Cellular automata and complexity*", Addison-Wesley, Menlo Park, CA, (1994).
- 17 D. Celentano, "Un modelo termomecánico para problemas de solidificación de metales", Tesis doctoral, Universidad Politécnica de Cataluña, Barcelona, (1994).
- 18 J. Borrajo, "Modelado de las características de los nódulos de grafito durante la solidificación de fundición esferoidal de pequeños espesores", tesis de máster, Universidad Nacional de Mar del Plata, Mar del Plata, (2002).



## APÉNDICE

En este trabajo se usan las líneas del diagrama de equilibrio de acuerdo a las expresiones propuestas por Heine<sup>7</sup>

$$\begin{aligned}
 T_{AL} &= 1569 - 97,3 \left( C + \frac{1}{4} Si \right) \\
 T_{AS} &= 1528 - 177,9(C + 0,18 Si) \\
 T_{GL} &= 389,1 \left( C + \frac{1}{3} Si \right) - 503,2 \\
 T_E &= 1154,6 + 6,5 Si
 \end{aligned}
 \tag{1}$$

El significado de las temperaturas  $T_{AL}$ ,  $T_{AS}$ ,  $T_{GL}$  y  $T_E$  se muestra en el diagrama de equilibrio de la Figura 13. Por intersección entre  $T_{AS}$  y  $T_E$  se obtiene el punto de máxima solubilidad de carbono en la austenita a temperatura eutéctica

$$C_{TE} = 2,1 - 0,216 Si \tag{2}$$

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

$$C_E = 4,26 - 0,317 Si \tag{3}$$

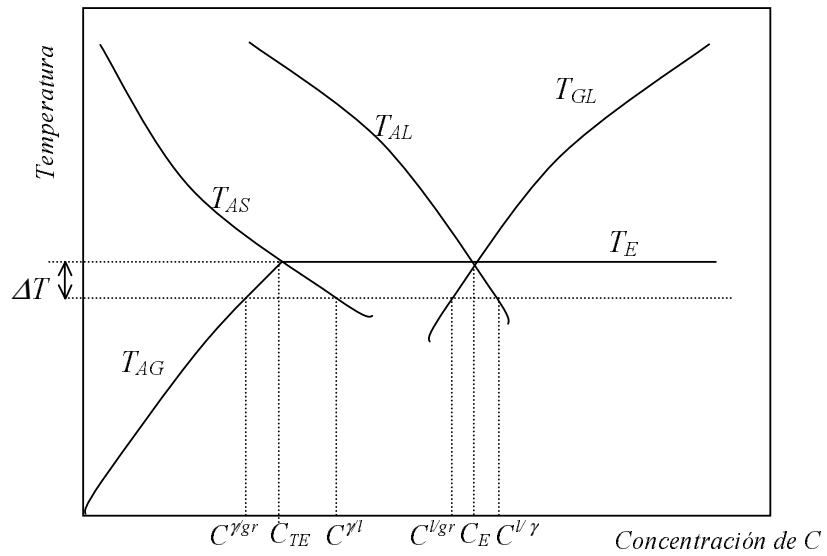
De las ecuaciones anteriores se pueden despejar los porcentajes de carbono en la zona de la interfase correspondientes a cada fase y cada temperatura

$$\begin{aligned}
 C^{l/r} &= \frac{1}{97,3} (1569 - T - 24,32 Si) \\
 C^{\gamma/l} &= \frac{1}{177,9} (1528,4 - T - 32 Si) \\
 C^{l/gr} &= \frac{1}{389,1} (T - 129,7 Si + 503,2)
 \end{aligned}
 \tag{4}$$

Para la definición de la línea  $T_{AG}$ , que determina la variación de la solubilidad del carbono en la austenita en estado sólido, se ubica el punto de coordenadas 800 °C y 0,6 % C, el cual se considera como el punto eutectoide, y se lo une con el punto  $C_{TE}$ , obteniéndose

$$C^{\gamma/gr} = \frac{(T - 1154,6 - 6,5 Si)(1,5 - 0,216 Si)}{(354,6 + 6,5 Si)} + 2,1 - 0,216 Si \tag{5}$$

Como se puede ver en el diagrama de la Figura 13, las curvas se hacen continuar por debajo de la temperatura eutéctica, de manera que si la temperatura baja por debajo de dicha temperatura y todavía sigue la solidificación, se tienen en cuenta esas prolongaciones para calcular las concentraciones de carbono de las distintas fases en las interfases. Esto quiere decir que se considera que en las interfases se cumplen las condiciones de equilibrio termodinámico.



**Figura 13.** Esquema de la región eutéctica de un diagrama Fe-C-Si para un determinado porcentaje de Si