



UNIVERSIDAD NACIONAL AUTÓNOMA DE MÉXICO

FACULTAD DE QUÍMICA

**MODELADO DE LOS CAMBIOS DE VOLUMEN
PRESENTES DURANTE EL ENFRIAMIENTO Y
SOLIDIFICACIÓN DE UNA PIEZA DE HIERRO
HIPOEUTECTICO**

TESIS

**QUE PARA OBTENER EL TÍTULO DE
INGENIERO QUÍMICO METALÚRGICO**

PRESENTA:

ABRAHAM JAIMES HERNÁNDEZ



México, D.F.

2011



Universidad Nacional
Autónoma de México

Dirección General de Bibliotecas de la UNAM

Biblioteca Central



UNAM – Dirección General de Bibliotecas
Tesis Digitales
Restricciones de uso

DERECHOS RESERVADOS ©
PROHIBIDA SU REPRODUCCIÓN TOTAL O PARCIAL

Todo el material contenido en esta tesis esta protegido por la Ley Federal del Derecho de Autor (LFDA) de los Estados Unidos Mexicanos (México).

El uso de imágenes, fragmentos de videos, y demás material que sea objeto de protección de los derechos de autor, será exclusivamente para fines educativos e informativos y deberá citar la fuente donde la obtuvo mencionando el autor o autores. Cualquier uso distinto como el lucro, reproducción, edición o modificación, será perseguido y sancionado por el respectivo titular de los Derechos de Autor.

JURADO ASIGNADO:

PRESIDENTE: Profesor Bernardo Fabián Campillo Illanes
VOCAL: Profesor José Alejandro García Hinojosa
SECRETARIO: Profesor Carlos González Rivera
1er SUPLENTE: Profesor Marco Aurelio Ramírez Argaez
2do SUPLENTE: Profesor Adrian Manuel Amaro Villeda

SITIO DONDE SE DESARROLLÓ EL TEMA:

Departamento de ingeniería metalúrgica
Facultad de química
UNAM

Dr. Carlos González Rivera
Asesor del tema

Ing. Eusebio Candido Atlatenco Tlapanco
Supervisor técnico

Abraham Jaimes Hernández
Sustentante

A mi madre

Quien siempre estuvo ahí para brindarme su apoyo e hizo hasta lo imposible para darme una buena educación.

AGRADECIMIENTOS

Agradezco en primer lugar a mi familia, a mi madre Julia Hernández, a mi hermano Manuel Hernández y a mi abuelita Carmen Sánchez, por su paciencia y por el apoyo que siempre me brindaron, aun en los momentos más difíciles.

A mis tíos, Cruz Chaparro, Carlos Mercado, Francisca Chaparro y Gustavo Vallejo, quienes me acogieron en sus hogares y con ello hicieron más sencilla mi carrera profesional.

A mis amigos, por mostrarme que ser universitario implica mucho más que la búsqueda de un título: Mariana Lozano, Mariana Domínguez, Carlos, Lida y Citlali por estar a mi lado durante los primeros años de mi vida universitaria; Itzel Morales, José Luis, Hiram Gómez, Alan, Itzel Castillo, Alicia, Víctor, Marcos, Daniel, Getziel y Alejandro por haber convertido esta etapa de mi vida en una grata experiencia que difícilmente olvidare.

Al Dr. Carlos González Rivera por la confianza depositada en mí para la realización de este trabajo.

A la Universidad Nacional Autónoma de México, pero en especial a la Facultad de Química, por permitirme ser parte de tan prestigiosa comunidad.

Al proyecto PAPIIT IN112209 con título "*Alimentación de piezas de hierro ductil*", dirigido por el Dr. Carlos González Rivera, por su apoyo en la elaboración y conclusión de este trabajo.

ÍNDICE

INTRODUCCIÓN	7
CAPÍTULO 1. MARCO TEÓRICO	9
1.1. Hierros colados.....	9
1.1.1. Manufactura por fundición	11
1.1.2. Comportamiento de las fundiciones durante la solidificación	12
1.1.3. Defectos de los hierros colados	15
1.2. Modelado del proceso de solidificación	19
1.2.1. Modelado de la transferencia de calor	20
1.2.2. Modelado de la cinética de solidificación.....	22
1.3. Modelado del cambio de volumen	27
CAPÍTULO 2. MODELO MATEMÁTICO.....	31
2.1. Descripción del problema.....	31
2.1.1. Suposiciones.....	32
2.2. Desarrollo del modelo.....	32
2.2.1. Modelo macroscópico de transferencia de calor.....	33
2.2.2. Modelo microscópico de cinética de solidificación	39
2.2.3. Modelo de cambio de volumen	43
2.2.4. Segregación.....	45
2.3. Propiedades termofísicas y parámetros	47
CAPÍTULO 3. SOLUCIÓN DEL MODELO	50
3.1. Método de solución.....	50
3.2. Algoritmo de cálculo.....	51
3.3. Diseño de las simulaciones: casos de estudio	53
CAPÍTULO 4. RESULTADOS Y DISCUSIÓN	56
4.1. Influencia de la temperatura de colada.....	56
4.2. Influencia del módulo de enfriamiento	58
4.3. Influencia de la composición química.....	61
4.3.1. Hierros hipoeutécticos	61

4.3.2. Hierros eutécticos.....	64
4.4. Influencia de la inoculación.....	68
4.5. Validación del modelo.....	69
Sin embargo, debido a que en el trabajo que está siendo comparado no se reportan las propiedades termofísicas empleadas no es posible comprobar la hipótesis antes enunciada.	71
CONCLUSIONES	72
BIBLIOGRAFÍA	74
APÉNDICE A. DENSIDAD DE LA AUSTENITA	77
APÉNDICE B. DIAGRAMA DE FLUJO	80
APÉNDICE C. PROGRAMA DE COMPUTO (PYTHON)	83

INTRODUCCIÓN

La manufactura por fundición actualmente es el único método viable para producir piezas con formas complejas ya que ofrece una flexibilidad de diseño no encontrada en otras técnicas de procesamiento. Sin embargo, junto con el proceso tradicional de fundición existe la posibilidad de que se presenten defectos tales como inclusiones y porosidades, que tienen un efecto negativo muy significativo en la producción, pues del 5 al 10% de todas las piezas producidas son rechazadas a causa de estos defectos [1]. En este sentido, los cambios de volumen ocurridos durante la solidificación son una de las principales causas por las que se generan las porosidades. En el caso de los hierros colados, hierros grises y dúctiles específicamente, asegurar una producción libre de estos defectos es particularmente difícil ya que, a diferencia de la mayoría de las aleaciones usadas en fundición, presentan una expansión durante la solidificación debido a la precipitación de grafito, una fase que tiene una densidad mas baja comparada con la del hierro. Como consecuencia, las tecnologías usadas para producir piezas sanas en la mayoría de las aleaciones tienen comportamientos erráticos cuando son aplicadas en los hierros colados [2, 3].

Por lo antes mencionado, resulta de gran importancia lograr una comprensión acerca del cambio de volumen ocurrido en los hierros colados durante el proceso solidificación y enfriamiento, y además como se afecta este comportamiento por los diversos parámetros involucrados. Con esto, es posible establecer la mejor estrategia de diseño y operación en la producción de piezas de hierro, logrando así piezas sanas, libres de porosidades.

Los modelos computacionales pueden ser una buena alternativa para el estudio del fenómeno antes referido, ya que es posible determinar cuantitativamente la influencia de los parámetros de operación sobre los

cambios de volumen asociados con el enfriamiento y la solidificación de manera rápida, y aun en etapas anteriores al diseño, permitiendo la toma de decisiones para desarrollar procedimientos de diseño y control.

Por lo tanto, el objetivo principal de este trabajo es el siguiente:

Desarrollar e implementar en un programa de cómputo un modelo mecanístico que sea capaz de predecir los cambios de volumen asociados con el enfriamiento y solidificación de una pieza de hierro colado desde que la aleación se encuentra en estado líquido, a la temperatura de colada, dentro de un molde de arena y durante su proceso de enfriamiento hasta que finaliza su solidificación.

Del objetivo anterior se desprenden además los siguientes objetivos particulares:

- Predecir los cambios de temperatura durante el enfriamiento y solidificación de una pieza cilíndrica con dimensiones conocidas.
- Predecir las cantidades relativas de fases formadas durante el proceso de enfriamiento y solidificación de la pieza.
- Calcular en función de la temperatura y de las cantidades y composición química de las fases presentes, la densidad promedio de la pieza.
- Calcular el cambio de volumen de la pieza durante su enfriamiento.

CAPÍTULO 1. MARCO TEÓRICO

En el presente capítulo se abordan de manera general los conceptos básicos involucrados en este trabajo de tesis, a fin de establecer de manera clara la magnitud del problema a tratar en dicho trabajo y cual ha de ser el camino mas conveniente para su solución.

1.1. Hierros colados

Los hierros colados o fundiciones son esencialmente aleaciones Fe-C-Si, en las que el contenido de carbono, C, es superior al carbono de saturación de la austenita (2.1 % a la temperatura eutéctica), y generalmente contienen hasta un 3.0 % de silicio, Si, para controlar la cinética de formación de carburos, lo que permite que el sistema evolucione según el diagrama de equilibrio estable, formándose grafito en lugar de cementita durante la solidificación [4]. Debido a su punto de fusión relativamente bajo ($\approx 1200^{\circ}\text{C}$) y a su baja viscosidad, estas aleaciones resultan excelentes para fundición. Además, es posible obtener piezas con formas complejas fáciles de maquinar. Estas características hacen de los hierros colados aleaciones muy versátiles en el diseño de piezas.

Los hierros colados presentan diferentes estructuras debido a las diferencias en la composición y a varios procesos de solidificación y enfriamiento. Por lo tanto, la manera más adecuada de clasificar estas aleaciones es en base a su estructura, donde las fases dominantes son la austenita, el grafito y la cementita. De acuerdo al criterio anterior, se distinguen cuatro tipos de hierros colados [5, 6]:

- Hierro gris. Es una aleación Fe-C-Si que incorpora un contenido de carbono del 2.5 % al 4.0 %. Dichas aleaciones también pueden contener pequeños porcentajes de Mn, S y P, que pueden presentarse durante el proceso de alto horno. Presentan una superficie de fractura

gris, que es consecuencia de la presencia de carbono en forma de hojuelas de grafito. La presencia de grafito produce una excelente fluidez, que hace posible producir piezas con secciones delgadas, además hace de esta aleación un material adecuado para absorber vibraciones. Las piezas de hierro gris presentan pocas cavidades por contracción y pocas porosidades. La fundición gris encuentra aplicaciones en monoblocks, cubiertas para motores eléctricos, bases para maquinas, herramientas y tuberías.

- Hierro blanco. Cuando un hierro colado mantiene un contenido bajo de silicio (menor al 1.5 %) o se obtiene con altas velocidades de enfriamiento, se da lugar a la formación de una fundición blanca. El nombre lo toma de la superficie de fractura característica, blanca y brillante. Consisten de una mezcla de cementita y perlita, lo que las convierte en aleaciones duras, frágiles y difíciles de mecanizar. Por esta razón en muchos casos es importante evitar la formación de hierro blanco, aunque hay que destacar que es útil en aplicaciones donde se requieren materiales con alta resistencia al desgaste. No se pueden forjar o deformar plásticamente, pues se rompen a causa de las tensiones. Se emplean por ejemplo, en forros y palas de molinos, o en rodillos de laminación.
- Hierro maleable. Este tipo de hierro primero se moldea como un hierro blanco y, posteriormente, se somete a un tratamiento térmico para obtener precipitados nodulares de grafito. La matriz puede ser ferrita, perlita o martensita. Tiene alta fluidez que permite obtener fácilmente piezas con formas complejas. Las piezas hechas de hierro maleable tienen buena superficie final, buena tolerancia dimensional, buena maquinabilidad y resistencia al impacto. Este hierro es ampliamente usado en la fabricación de partes automotrices, herramientas pequeñas y partes de ferrocarriles.

- Hierro dúctil. Se obtiene al tratar el hierro líquido con pequeñas cantidades de magnesio, cerio u otros agentes que sean capaces de inducir la depositación de grafito libre en forma de esferoides. La estructura resultante tiene un gran efecto sobre las propiedades del hierro: posee una mayor elasticidad y resistencia mecánica que los hierros grises. Estas fundiciones presentan buena fluidez y moldeabilidad, se mecanizan muy bien y tienen buena resistencia al desgaste. Se utilizan en piñones, válvulas, tubería, etc.

1.1.1. Manufactura por fundición

La fundición es un proceso de fabricación que consiste en llevar un material a un estado fluido por calentamiento, y después colar ese fluido en un molde, dejando que solidifique. Con estos procesos se pueden fabricar piezas de elevada complejidad geométrica, y en general el costo asociado es bajo. Sin embargo, la calidad superficial y dimensional que genera este procedimiento es escasa, razón por la que una pieza fundida necesita normalmente un posterior maquinado. Además, las propiedades mecánicas no son muy buenas, comparadas con las obtenidas por ejemplo mediante conformado mecánico. En los hierros la fundición se lleva a cabo generalmente en cubilotes u hornos de inducción donde se procura llevar el hierro fundido a una temperatura y composición adecuadas.

La inoculación es un paso muy importante para la producción de hierros colados y consiste en la adición de FeSi inoculante para promover la nucleación heterogénea y así disminuir la tendencia a la formación de Fe_3C , estructura que se caracteriza por ser muy frágil. En ocasiones al hierro líquido se le agrega Mg o Ce antes de la inoculación para cambiar la microestructura típica de un hierro gris que son hojuelas de grafito a esferoides de grafito que precipitan sobre la matriz sin necesidad de algún tratamiento térmico.

El proceso tradicional es la fundición en arena, por ser ésta un material refractario muy abundante en la naturaleza y que, mezclada con otras sustancias, adquiere cohesión y moldeabilidad sin perder la permeabilidad que posibilita la salida de los gases del molde al tiempo que se vierte el metal fundido. Consiste en colar un metal fundido en un molde de arena, dejarlo solidificar y posteriormente romper el molde para extraer la pieza fundida. La fundición en arena requiere un modelo a tamaño natural de madera, plástico y/o metales que define la forma externa de la pieza que se pretende reproducir y que formará la cavidad interna en el molde una vez montado en lo que se conoce como placa modelo, en el caso de moldes bipartidos. Para el diseño del modelo se debe tener en cuenta una serie de medidas derivadas de la naturaleza del proceso de fundición como pueden ser: 1) debe ser ligeramente más grande que la pieza final, ya que se debe tener en cuenta la contracción de la misma una vez se haya enfriado a temperatura ambiente; 2) en esta condición se debe dar un sobredimensionamiento en los casos en el que se dé un proceso adicional de maquinado o acabado por arranque de viruta; y 3) las superficies del modelo deberán respetar unos ángulos mínimos con relación a la dirección de desmoldeo, con objeto de no dañar el molde de arena durante su extracción. Este ángulo se denomina ángulo de salida.

Hay que destacar que existen diversas técnicas de moldeo, además de la ya mencionada, tales como el proceso a la cera perdida, molde permanente, por gravedad o a presión; sin embargo, las piezas de hierro colado son fabricadas comúnmente a partir de moldes de arena [4, 7].

1.1.2. Comportamiento de las fundiciones durante la solidificación

El enfriamiento y solidificación de un metal o aleación se lleva a cabo en tres etapas. La etapa I se extiende desde la temperatura inicial del líquido sobrecalentado hasta la temperatura de inicio de la solidificación. La etapa

II corresponde al tiempo durante el cual se efectúa la solidificación y se caracteriza por llevarse a cabo a una temperatura casi constante en el caso de metales puros o aleaciones de composición eutéctica. Para aleaciones de composición diferente a la eutéctica, la solidificación tiene lugar dentro de un rango de temperaturas, tal como lo muestra la Figura 1. Finalmente, cuando el proceso de solidificación termina, inicia la etapa III que consiste en el enfriamiento del material sólido hasta temperatura ambiente [6, 8].

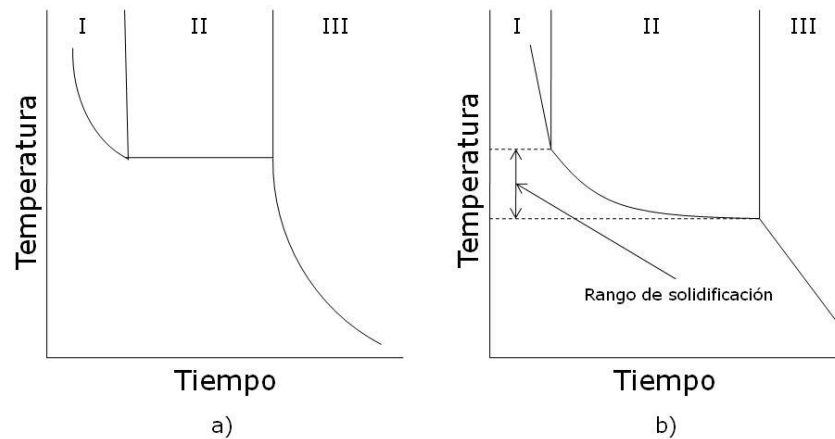


Figura 1. Curva de enfriamiento para a) un metal puro y b) una aleación [8].

Mientras el enfriamiento y solidificación tiene lugar, el volumen del metal o aleación decrece en la mayoría de los casos. Durante el enfriamiento desde el estado líquido hasta la temperatura ambiente tienen lugar tres tipos de contracción:

- Contracción del material líquido desde la temperatura de colada hasta la temperatura a la que inicia la solidificación, denominada contracción líquida.
- Contracción por solidificación. Ocurre a la temperatura en que inicia la solidificación y concluye una vez que el material ha solidificado por completo.
- Contracción durante el enfriamiento de la fase sólida hasta temperatura ambiente, conocida como contracción en estado sólido.

La Figura 2 muestra los cambios de volumen específico como función de la temperatura durante el proceso de enfriamiento y solidificación de un metal puro y una aleación respectivamente. Se observa que el metal puro sufre un cambio de volumen debido a la solidificación a una temperatura constante (T_F), mientras que la aleación cambia de volumen dentro de un intervalo de temperaturas definido por la temperatura del líquidus (T_L) y la temperatura del sólidus (T_S) [8].

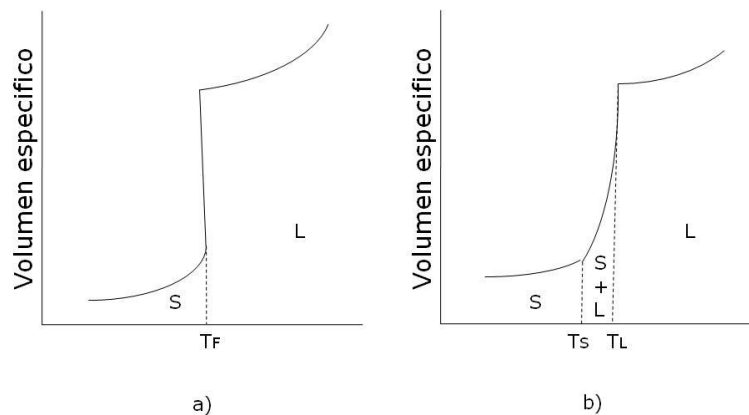


Figura 2. Cambios de volumen específico como función de la temperatura para a) un metal puro y b) una aleación [8].

En el caso de los hierros colados, específicamente hierros grises y dúctiles, el cambio dimensional durante el enfriamiento y solidificación se lleva a cabo de manera completamente diferente a la ya descrita. En estas aleaciones se distinguen cuatro regiones de cambio dimensional durante la solidificación y enfriamiento (ver Figura 3) [9]:

- A. Contracción del líquido desde la temperatura de colada hasta la temperatura del líquidus.
- B. Contracción del material al descender por debajo de la temperatura del líquidus. Se debe a que una porción de hierro líquido transforma en austenita, una fase sólida más densa que el líquido. En los hierros altamente hipereutecticos, grafito precipita en lugar de austenita provocando una expansión.

C. Expansión eutéctica. Ocurre durante la solidificación del microconstituyente eutéctico y se debe a que la totalidad del carbono disuelto en el metal líquido, menos el carbono disuelto en la austenita, precipita como grafito, el cual posee un volumen específico mucho mayor que el hierro, provocando una expansión.

El grafito que forma parte del eutéctico puede precipitar en forma de hojuelas o puede precipitar como nódulos, dependiendo de si se adiciona o no magnesio o cerio a la aleación. Esta diferencia en el mecanismo de crecimiento tiene un impacto importante en la expansión de las fundiciones durante la solidificación. Se ha observado que la expansión es mayor en los hierros donde el grafito precipita como nódulos [9, 10].

D. Contracción de la aleación en estado sólido.

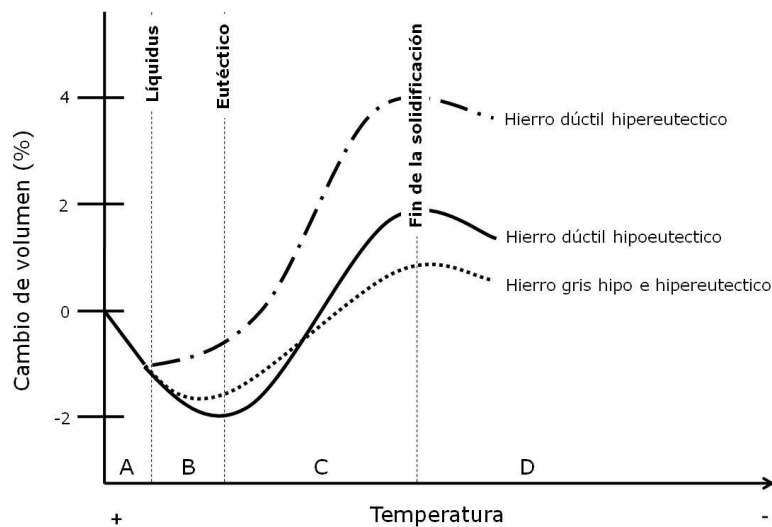


Figura 3. Cambio de volumen de diversos tipos de hierros colados [9].

1.1.3. Defectos de los hierros colados

Varios defectos pueden desarrollarse durante el proceso tradicional de fundición. Estos defectos se deben a un mal diseño del modelo, del sistema de alimentación o debido a una inadecuada técnica de vaciado. Los defectos más comunes son: proyecciones metálicas, porosidades,

rechupes, discontinuidades, defectos superficiales, piezas incompletas, dimensiones incorrectas e inclusiones [11]. De todos ellos, las inclusiones, los rechupes o cavidades causadas por contracción líquida o durante la solidificación y las porosidades constituyen la razón más frecuente de rechazo de piezas de hierro, ya que cerca del 5 al 10% de las piezas producidas son rechazadas debido a estos defectos [1].

Inclusiones

Las inclusiones son partículas presentes cuando el metal se encuentra tanto en estado líquido como en estado sólido. La mayor parte de las inclusiones en los hierros colados son óxidos que pueden provenir de varios sitios, como refractarios de hornos, ceniza de combustible, revestimiento de ollas, oxidación durante la fundición y oxidación durante el vaciado. Además, partículas no metálicas o intermetálicas pueden ser introducidas en el metal líquido durante la carga de material o durante varias operaciones de procesamiento [1].

Rechupes y porosidades

Los rechupes y porosidades en los hierros colados son cavidades que resultan a causa del movimiento de las paredes del molde, gases disueltos, por la contracción durante la solidificación o por una combinación de estas tres.

La cavidad asociada con el movimiento de las paredes del molde ocurre cuando la pared no es lo suficientemente rígida para soportar la presión que ejerce el metal líquido. Esto causa una modificación en las dimensiones del molde y como resultado, el metal de alguna otra porción de la pieza fluye hacia la porción modificada del molde provocando una deficiencia de metal, dando lugar a una cavidad. Cabe mencionar que en los hierros dúctiles y grises el movimiento de las paredes del molde también puede

ocurrir debido a la presión que se ejerce sobre la interface metal/molde como resultado de la expansión del metal durante la solidificación del microconstituyente eutéctico, y en este caso, en lugar de cavidades, puede ocurrir un hinchamiento de la pieza.

Los defectos ocasionados por gases disueltos en el metal líquido se deben a que, cuando inicia la solidificación, estos son expulsados de la solución y comienzan a acumularse en regiones interdendríticas, lo que ocasiona la formación de microporosidades [1, 11].

Ahora bien, cuando existe una inadecuada alimentación de metal durante la solidificación y enfriamiento se producen los defectos por contracción. Para el caso de los hierros colados (hierros dúctiles y grises), este problema requiere especial atención porque los sistemas diseñados para eliminar los defectos por contracción en la mayoría de las aleaciones presentan un comportamiento errático cuando son usados en los hierros debido a la complejidad del proceso de solidificación de estas aleaciones [2], que ya fue descrito en el apartado 1.1.2.

Dentro de los defectos por contracción existen tres tipos que ocurren a diferentes tiempos durante la solidificación, mostrados en la Figura 4: hundimientos, macro rechupes y micro rechupes [9].

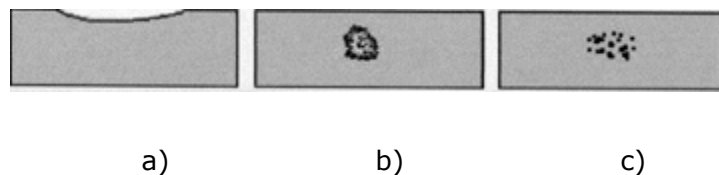


Figura 4. Apariencia de los tipos de defectos producidos por contracción durante la solidificación: a) hundimiento, b) macro rechupe y c) micro rechupe [9].

Los hundimientos se producen al inicio de la solidificación (región S1 en la Figura 5). La capa de metal que se forma en la parte superior de las paredes internas del molde es extremadamente delgada, si no existe alimentación de metal la contracción puede causar una presión negativa

justo debajo de la capa. Entonces la presión atmosférica presiona la pared del molde produciendo una cavidad.

Los macro rechupes (cavidades mayores a 5mm) aparecen poco después de iniciada la solidificación, región S1, y durante la región designada como S2 en la Figura 5. En estas circunstancias la capa formada en las paredes internas del molde es lo bastante gruesa como para colapsar, por lo tanto, la presión negativa generada por la contracción de la aleación produce muchas cavidades en el interior de la pieza. Un sistema de colada adecuado es suficiente para eliminar este defecto. Desde un punto de vista químico, los hierros hipoeutéticos (grises y ductiles) son bastante susceptibles a sufrir este tipo de defecto. Una gran separación entre la temperatura del líquidus, T_L , y la eutéctica, T_E , produce mucha austenita que reduce la capacidad de los alimentadores de proporcionar metal.

Los micro rechupes (cavidades menores a 3 mm) aparecen muy tarde en la solidificación, a finales de la región S3. En esta etapa el cuello del alimentador ya se encuentra cerrado. Este tipo de porosidad se presenta comúnmente en sitios que se encuentran más allá de los alcances del sistema de alimentación. La única forma eliminar estos defectos es procurar que la precipitación de grafito eutéctico, con su inherente expansión, llene los espacios vacíos.

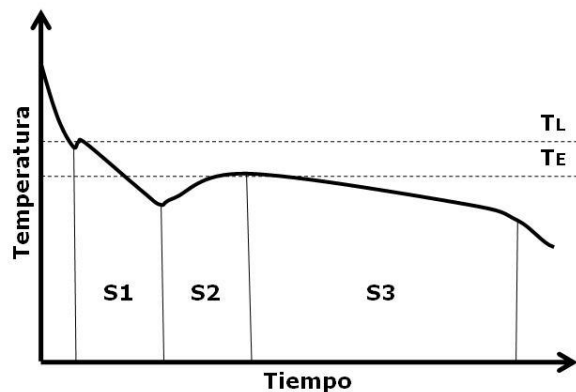


Figura 5. Curva de enfriamiento típica. La región S1 corresponde a la precipitación de la austenita y en la región S2 y S3 se lleva a cabo la precipitación del eutéctico [9].

1.2. Modelado del proceso de solidificación

La solidificación es un proceso que está involucrado en la manufactura de la mayoría de los componentes hechos con metales y aleaciones. Las características microestructurales que se desarrollan durante este proceso (porosidad, tamaño de inclusiones y distribución, tamaño de grano, microsegregación y macrosegregación) además de influir en las propiedades de los componentes, influyen en el éxito de posteriores etapas de procesamiento y por lo tanto en la productividad. Por ello surge la necesidad de alcanzar una adecuada comprensión del fenómeno de solidificación y de la influencia de los parámetros involucrados sobre las características del producto de fundición. En este sentido, la modelación matemática y computacional constituye una herramienta poderosa para el estudio del fenómeno de solidificación, ya que con esta es posible analizar el problema rápidamente y en etapas anteriores al diseño, permitiendo la toma de decisiones para desarrollar procedimientos de diseño y control [12]. Se distinguen tres tipos de modelos en ingeniería [13]:

- Modelos empíricos. Están basados enteramente en resultados experimentales y en la experiencia. Generalmente se utilizan resultados tabulados, obtenidos de pruebas industriales.
- Modelos semi-empíricos. También están basados principalmente en resultados experimentales, pero tienden a emplear algunas relaciones físicas y ecuaciones algebraicas para extender la habilidad predictiva del modelo más allá de los alcances de los resultados experimentales.
- Modelos mecanísticos. Parten de principios de conservación y de consideraciones termodinámicas y cinéticas que describen los fenómenos considerados

En lo referente al proceso de solidificación de aleaciones, el desarrollo de modelos se ha enfocado en diferentes aspectos de interés como:

- Transformaciones de fase, por ejemplo, morfología de las fases resultantes y su cinética de transformación.
- Transferencia de calor por todos los mecanismos dentro de la aleación, dentro del molde y hacia el ambiente.
- Flujo de fluidos en el seno del líquido, en la zona mushy (región donde el sólido y el líquido coexisten), y en el molde.
- Transferencia de materia por difusión en la fase líquida y sólida y por convección en el seno del líquido.
- Acumulación de esfuerzos por deformación termoplástica, plástica y por deslizamiento.

Como puede verse, los aspectos fenomenológicos que se abordan son: fenómenos de transporte, cinética de transformación de fases y mecánica del estado sólido. En la actualidad existen muchos avances en la simulación de estos aspectos, lo cual ha provocado la disponibilidad de software comercial que puede simular uno o varios de los aspectos arriba enlistados como MAGMASOFT, PROCAST, FLOW3D, FLUENT y PHOENICS entre otros. Todos ellos parten de la disponibilidad de macro-micro modelos de solidificación y puesto que se trata de aproximaciones hay que analizarlos críticamente. Un macro-micro modelo de solidificación resuelve las ecuaciones asociadas al fenómeno macroscópico de transporte de energía (HT) simultáneamente con las ecuaciones relacionadas con la cinética de transformación de fase (SK). A continuación se discuten los aspectos más relevantes de los macro-micro modelos de solidificación, ya que constituyen la base del modelo desarrollado en el presente trabajo de tesis.

1.2.1. Modelado de la transferencia de calor

La parte macroscópica de un modelo de solidificación consiste en la resolución de la ecuación de conservación de energía, donde generalmente

se considera que el principal mecanismo de transferencia de energía es la conducción:

$$C_p \rho \frac{dT}{dt} = \nabla(k \nabla T) + \dot{Q} \quad (1.1)$$

donde C_p es el calor específico, ρ es la densidad, k es la conductividad térmica y \dot{Q} es el flujo de calor latente liberado debido a la solidificación. Cuando no existe transformación de fase el término \dot{Q} es nulo.

Para resolver la ecuación anterior es necesario definir las condiciones de frontera e iniciales. Las condiciones de frontera pueden ser de tres tipos [14]. En el primer tipo la temperatura en la frontera es especificada mientras que en el segundo tipo el flujo de calor es el que se especifica. En el tercer tipo de condición de frontera, que es la que goza de mayor popularidad, se expresa la pérdida de calor en la interfase a través del coeficiente de transferencia de calor:

$$-k \left. \frac{dT}{dx} \right|_{x=frontera} = h(T - T_0) \quad (1.2)$$

donde h es el coeficiente de transferencia de calor de interface y T_0 es la temperatura ambiente o adyacente a la frontera en el molde. En el caso más general, el coeficiente de transferencia de calor esta dado por:

$$h = h_r + h_c \quad (1.3)$$

donde h_r y h_c son los coeficientes de transferencia de calor radiativo y convectivo respectivamente. El coeficiente de transferencia por radiación esta dado por:

$$h_r = \sigma \varepsilon F (T^2 + T_0^2)(T + T_0) \quad (1.4)$$

donde σ , ε y F son la constante de Stefan-Boltzmann, la emisividad del molde y el factor de forma del molde con respecto al aire,

respectivamente. El factor de forma esta definido como la fracción de la radiación que deja la superficie i en todas direcciones y es interceptado por la superficie j .

El coeficiente de transferencia por convección, valido en el caso de convección natural, es:

$$h_c = c(T - T_0)^{1/3} \quad (1.5)$$

donde c es una constante dependiente de la geometría de la superficie.

1.2.2. Modelado de la cinética de solidificación

La solución de la ecuación (1.1) requiere que el término \dot{Q} se conozca (la rapidez de la evolución de calor latente durante la solidificación). Este término puede ser obtenido de dos formas: mediante el método de calor específico o mediante el método de calor latente.

Método de calor específico

En esta aproximación clásica, el calor latente esta relacionado por la suposición de que el sólido se forma en un rango de temperatura específico. El calor específico es modificado para quedar como:

$$C_p^* = C_p - \frac{L}{\rho} \frac{df_s}{dT} \quad (1.4)$$

donde L es el calor latente y df_s/dT es la rapidez de cambio de la fracción sólida con respecto a la temperatura, obtenida del diagrama de fases.

$$f_s = 1 - \left[\frac{T_f - T}{T_f - T_L} \right]^{k_0 - 1} \quad (1.5)$$

La ecuación (1.5) es un ejemplo de las expresiones que pueden emplearse para determinar la evolución de la fracción sólida. En dicha ecuación,

derivada del modelo de microsegregación de Scheil, T_f es la temperatura de fusión del metal puro, T_L es la temperatura del líquido y k_0 es el coeficiente de partición de la aleación. Estos parámetros son obtenidos del diagrama de fases de la aleación. La limitación de esta aproximación es que no se puede obtener información referente a la microestructura como el tamaño de grano [14].

Método de calor latente

En el método de calor latente, el término \dot{Q} en la ecuación (1.1) es evaluado basándose en que la cinética de nucleación y crecimiento es aplicable a las transformaciones ocurridas en el sistema. La expresión para \dot{Q} esta dada por:

$$\dot{Q} = L \frac{df_s}{dt} \quad (1.6)$$

donde L es el calor latente de la fase solidificada y df_s/dt es la rapidez de evolución de la fracción sólida. Dependiendo de la naturaleza de la aleación, la expresión df_s/dt puede variar, sin embargo aquí se describe la cinética de solidificación para estructuras equiaxiales, que son las que comúnmente prevalecen en los sistemas de hierro colado.

Solidificación

El modelado de la evolución de la fracción sólida durante la solidificación equiaxial dendrítica o eutéctica parte de tres suposiciones básicas: 1) todos los granos que han nucleado permanecen hasta el final del proceso (se desprecia la coalescencia y la disolución de granos en crecimiento), 2) una vez nucleados, los granos permanecen en posiciones fijas (la velocidad de la fase solida es nula) y 3) los granos que crecen adoptan una geometría esférica [15]. Bajo estas condiciones, la fracción sólida promedio se obtiene de la siguiente expresion:

$$f_s = \frac{4}{3}\pi NR^3 \quad (1.7)$$

donde R es el radio de los granos presentes y N es la densidad de granos. La ecuación (1.7) solo es válida al inicio de la solidificación, ya que a medida que la fracción sólida se incrementa, se produce un retardo en el crecimiento de los granos a consecuencia de la interacción entre los granos en crecimiento. Este fenómeno se conoce como interbloqueo y al considerarlo se obtiene la ecuación de Johnson-Mehl [14, 15]:

$$\frac{df_s}{dt} = (1 - f_s)4\pi NR^2 \frac{dR}{dt} \quad (1.8)$$

El cálculo de la densidad de granos es la etapa más complicada en el modelado de la cinética de solidificación, debido a que la teoría formal de la nucleación no se puede aplicar en los cálculos. Por ello, existen dos métodos para resolver este problema, por medio de los modelos de nucleación continua y por medio de los modelos de nucleación instantánea. Los modelos de nucleación continua asumen que el número de núcleos formados es una función de la temperatura. Adicionalmente, se supone que la nucleación continua hasta que la solidificación termina o cuando hay una recalescencia y la rapidez de enfriamiento se hace positiva.

En contraste, los modelos de nucleación instantánea suponen que la totalidad de los núcleos se generan a una temperatura determinada [16, 17].

Las ecuaciones (1.9) y (1.10) son un ejemplo de los modelos de nucleación instantánea y continúa respectivamente, que pueden encontrarse en la literatura [16, 17].

$$N = a + b \left(\frac{dT}{dt} \right)^2 \quad (1.9)$$

$$N = A\Delta T^2 \quad (1.10)$$

La ecuación (1.9) fue propuesta por Stefanescu y colaboradores, donde N es el número de núcleos por unidad de volumen, a y b son parámetros que deben ser determinados experimentalmente para cada aleación. En tanto que la ecuación (1.10) corresponde al modelo de nucleación continúa propuesto por Oldfield en el que ΔT es el subenfriamiento local del líquido y A es un coeficiente de nucleación que se determina experimentalmente.

El crecimiento dendrítico y eutéctico es muy complejo, por ello, muchas de las aproximaciones adoptadas para su análisis requieren de una simplificación significativa, particularmente con respecto a la morfología de crecimiento [17]. Estas simplificaciones se hacen atendiendo las particularidades de crecimiento de cada uno de los microconstituyentes, resultando en modelos de crecimiento aplicables para cada caso. El crecimiento eutéctico se caracteriza en que los granos son totalmente sólidos, mientras que en el crecimiento dendrítico los granos en crecimiento son parcialmente sólidos, lo cual complica aun más el planteamiento de los modelos que describan su evolución.

Muchas de las relaciones que describen a cinética de crecimiento del microconstituyente eutéctico tienen la forma de la ecuación (1.11), en la que se relaciona la velocidad de crecimiento, V , del grano con el subenfriamiento local:

$$V = \frac{dR}{dt} = \mu \Delta T^2 \quad (1.11)$$

donde R es el radio de un grano esférico simple y μ es un coeficiente de crecimiento.

La ecuación (1.11) también se puede emplear para describir la cinética de crecimiento dendrítico, sin embargo, es difícil encontrar coeficientes de crecimiento para esta fase en la literatura. Por ello, generalmente se adopta una aproximación diferente, como la propuesta por Kanetkar y

Stefanescu [18], que se basa en la difusión de soluto y toma en cuenta las siguientes suposiciones:

- La dendrita crece en una esfera de radio R_L , donde R_L es el radio final de la dendrita (obtenido de datos experimentales).
- El crecimiento de la dendrita es debido a la supersaturación, que es indicado por el valor del número de Péclet solutal. Para rapidezces de enfriamiento normales, el crecimiento se asume proporcional al cuadrado de $\Delta C = C^* - C_a$, donde C^* es la concentración en la interface sólido/líquido y C_a es la concentración promedio de soluto en el líquido.
- La concentración de interface C^* es calculada a partir de un balance dentro del volumen del grano.
- En cualquier punto de la superficie de la dendrita se tiene la misma concentración. La concentración del sólido en la interface es kC^* y la concentración del líquido en la interface es C^* .

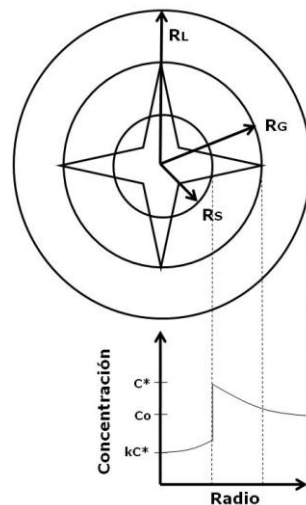


Figura 6. Modelo de crecimiento dendrítico. R_S es el radio de una esfera de solido equivalente, R_G es el radio de un grano en crecimiento y R_L el radio final de un grano [18].

Con las suposiciones anteriores, la rapidez de crecimiento dendrítico se expresa como:

$$\frac{dR_S}{dt} = M_d(C^* - C_a)^2 \quad (1.12)$$

Donde M_d es una constante de crecimiento que esta dada por:

$$M_d = \frac{Dm}{\pi^2 \Gamma (k_0 - 1) C_0} \quad (1.13)$$

donde D es el coeficiente de difusión en el líquido, Γ el coeficiente de Gibbs-Thompson, k_0 el coeficiente de partición, C_0 la concentración inicial de la aleación y m es la pendiente de la línea del líquidus.

1.3. Modelado del cambio de volumen

Procurar una producción de piezas por fundición libre de defectos es particularmente complicado en el caso de los hierros grises y dúctiles debido a la dificultad para predecir los cambios de volumen ocurridos durante la solidificación de estas aleaciones (ver apartado 1.1.2). En este sentido existen pocos estudios sobre los aspectos teóricos. Sin embargo, varios modelos han sido desarrollados para intentar simular los cambios de volumen y la influencia de los parámetros del proceso sobre estos cambios. Algunos de estos modelos se describen a continuación.

En un trabajo publicado por Heine [19] se lleva a cabo una primera aproximación para estimar los cambios de volumen de hierros grises y dúctiles de composición eutéctica durante su solidificación y enfriamiento a partir de datos experimentales. La metodología propuesta consiste en seguir el curso de los cambios de volumen de las aleaciones a partir del cálculo del volumen específico (inverso de la densidad) a la temperatura de colada, eutéctica, eutectoide y a temperatura ambiente. Con los resultados obtenidos a las temperaturas antes referidas el autor genera una curva, uniendo los puntos, que describe los cambios de volumen en función de la temperatura. El volumen específico del hierro en estado líquido se obtiene directamente de datos experimentales, mientras que el volumen específico del sólido (de composición eutéctica) se obtiene al realizar un promedio de

los valores de las fases que lo componen con base en el diagrama de equilibrio Fe-C. Con este modelo no es posible obtener la cinética de cambio de volumen ya que se vale exclusivamente de la información que ofrece el diagrama de equilibrio.

En la literatura existen también trabajos en los que se intenta describir los cambios de volumen de los hierros a partir de simulaciones numéricas. Las consideraciones fundamentales que se hacen en estas simulaciones son el desarrollo de un modelo cinético de solidificación que considere los efectos de los parámetros de operación sobre el modo y secuencia de solidificación, y la aplicación del modelo para estimar los cambios de volumen ocurridos durante el enfriamiento. Se distinguen dos aproximaciones para simular el comportamiento de las aleaciones durante la solidificación en este tipo de trabajos: mediante un análisis térmico y a partir de un modelo microestructural.

Dentro del primer grupo de aproximaciones se distinguen trabajos como el desarrollado por Bradley [20], quien desarrolla un algoritmo para estimar los cambios de volumen ocurridos durante la solidificación de un hierro dúctil. En dicho trabajo se parte del término de generación de calor que aparece en la ecuación de conservación de energía (ecuación (1.1)):

$$\dot{Q} = \frac{d}{dt} [\rho_{\gamma} L_{\gamma} f_{\gamma} + \rho_G L_G f_G] \quad (1.14)$$

Entonces, la fracción f en la ecuación anterior se expresa en términos del volumen de las fases individuales (austenita γ y grafito G) y el volumen total del dominio, se integra la ecuación (1.14) sobre un intervalo de tiempo arbitrario, dentro del rango de transformación de fase, y finalmente se reacomoda la expresión resultante, asumiendo que el volumen total y las densidades de las fases permanecen constantes sobre el intervalo de tiempo:

$$V_T^t \int_t^{t+\Delta t} \dot{Q}(t) dt = \rho_\gamma L_\gamma \Delta V_\gamma + \rho_G L_G \Delta V_G \quad (1.15)$$

Una vez que la función de generación de calor $\dot{Q}(t)$ es determinada a priori usando una curva de enfriamiento, el lado izquierdo de de la ecuación (1.15) puede ser evaluada en cada intervalo de tiempo. Para determinar el cambio de volumen en cada intervalo de tiempo se necesitan dos ecuaciones adicionales que se obtienen de un balance de materia. Un balance global para un intervalo de tiempo dado:

$$\rho_L \Delta V_L + \rho_\gamma \Delta V_\gamma + \rho_G \Delta V_G = 0 \quad (1.16)$$

y un balance de conservación de carbono en el líquido, austenita y grafito:

$$w_L^C \rho_L \Delta V_L + w_\gamma^C \rho_\gamma \Delta V_\gamma + \rho_G \Delta V_G = 0 \quad (1.17)$$

Donde w^C se refiere a la fracción en peso de carbono en las fases individuales. Resolviendo el sistema de ecuaciones (1.15), (1.16) y (1.17) se puede estimar el cambio de volumen del sistema durante la solidificación. El autor remarca la ventaja de emplear este método ya que es posible simular el subenfriamiento y recalcencia durante el enfriamiento, que es difícil simular usando métodos convencionales para el manejo del calor latente. Sin embargo, en este método es necesario realizar experimentos para obtener la curva de enfriamiento de la cual deriva la función $\dot{Q}(t)$, lo que lo hace un método relativamente tardado en su implementación.

Por otra parte, los trabajos desarrollados por Chen y colaboradores [21, 22, 23] son un ejemplo de simulaciones numéricas que describen el comportamiento de las aleaciones durante la solidificación mediante un modelo microestructural, basado en aspectos de nucleación y crecimiento. En tales trabajos, un modelo de transferencia de calor unidimensional es

acoplado al modelo de nucleación de Oldfield y a los modelos de crecimiento desarrollados por Glickman y Schaefer y por Rappaz y Su para simular el desarrollo estructural de hierros dúctiles de composición hipoeutéctica, eutéctica e hipereutéctica. Los resultados arrojados por los modelos anteriores son usados para estimar la densidad del sistema en un tiempo dado mediante la expresión (1.18) y con los valores resultantes determinar el cambio de volumen.

$$\rho_{mezla} = f_L \rho_L + f_G \rho_G + f_A \rho_A \quad (1.18)$$

donde f y ρ son la fracción y densidad, L , G y A representan al líquido, grafito y austenita, respectivamente. Con el modelo desarrollado se estudia la influencia de diversos parámetros de operación sobre los cambios de volumen, como son la composición química, la temperatura de colada y la inoculación, entre otros. Si bien en estos trabajos se hace un análisis detallado de los resultados arrojados por el modelo, poco se comenta acerca del método empleado para calcular las densidades del líquido, austenita, grafito y los cambios de volumen, así como la forma en que se acopló el modelo de cambio de volumen con los de transferencia de energía y de cinética de solidificación.

CAPÍTULO 2. MODELO MATEMÁTICO

En este capítulo se describe la metodología adoptada en el desarrollo de un macro-micro modelo capaz de predecir el historial térmico, la cinética de solidificación y los cambios de volumen ocurridos durante el enfriamiento de una pieza de hierro colado contenida en un molde de arena.

2.1. Descripción del problema

El sistema bajo estudio consiste de un cilindro de hierro colado de dimensiones conocidas con composición hipoeutéctica o eutéctica, inicialmente líquido a una temperatura superior a la del líquidus. El líquido se encuentra confinado en un molde de arena y posteriormente se enfría, pasando por un proceso de solidificación. Debido a los cambios de temperatura y a la formación los diferentes microconstituyentes durante la solidificación, la densidad promedio de la pieza varía con el tiempo, lo que implica un cambio de volumen durante el proceso, mismo que representa el objeto de estudio del presente trabajo.

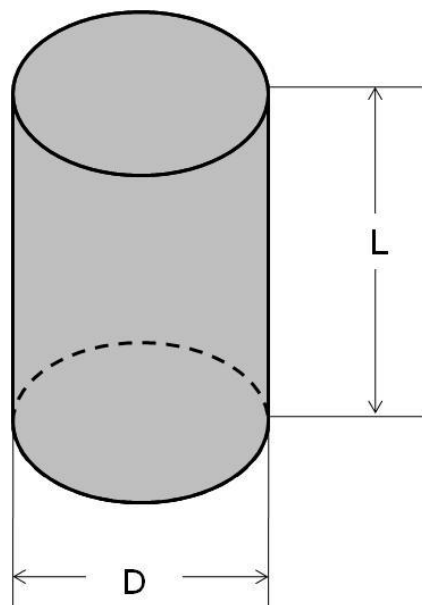


Figura 7. Representación del sistema bajo estudio.

2.1.1. Suposiciones

En el sistema descrito anteriormente están involucradas infinidad de variables que afectan en mayor o menor medida la manera en que este evoluciona. Para la solución del problema es necesario despreciar algunas de estas variables a fin de disminuir su complejidad. Esto se logra realizando ciertas suposiciones que discriminen los fenómenos de menor relevancia en el proceso estudiado. En este caso, las suposiciones adoptadas son:

- a) Aun cuando típicamente un hierro colado contiene pequeños porcentajes de manganeso, azufre y fósforo (entre otros), se supone que la aleación pertenece al sistema ternario Fe-C-Si.
- b) No existen gradientes térmicos dentro de la aleación, lo cual implica que a cualquier tiempo la temperatura es uniforme en toda la pieza.
- c) Las propiedades termofísicas de la aleación son constantes con respecto a la temperatura y se relacionan con las propiedades de los constituyentes individuales a partir de la regla de las mezclas, la cual se fundamenta en la suma de los productos de las propiedades individuales y sus fracciones en volumen respectivas.
- d) La transferencia de calor hacia los alrededores es por convección.
- e) No hay generación ni acumulación de materia dentro del sistema.
- f) No se consideran las transformaciones de fase en estado sólido durante el enfriamiento de la aleación.

2.2. Desarrollo del modelo

El modelo a desarrollar consta de tres partes principales: (i) un modelo macroscópico capaz de simular la transferencia de calor durante el enfriamiento y solidificación del hierro; (ii) un modelo microscópico que simula la cinética de solidificación; y, (iii) un modelo que determina los

cambios de volumen en el hierro, partiendo de los resultados generados en los dos modelos anteriores. A continuación se presenta el desarrollo de los modelos antes mencionados.

2.2.1. Modelo macroscópico de transferencia de calor

El problema de transferencia de calor puede resolverse a partir de dos aproximaciones: global, que considera la ausencia de gradientes térmicos, e infinitesimal, que considera la presencia de gradientes térmicos.

En este trabajo, de acuerdo con las suposiciones planteadas, se adopta una aproximación global que consiste en definir un balance de energía sobre la aleación de volumen V , en contacto con el molde a través de la interfase metal-molde de área A , definido por la ecuación (2.1) [15]:

$$A \frac{dq}{dt} + L \frac{df_s}{dt} = \rho_{ef} C_{p_{ef}} V \frac{dT}{dt} \quad (2.1)$$

donde L es calor latente de fusión, ρ_{ef} es la densidad efectiva y $C_{p_{ef}}$ la capacidad calorífica efectiva, determinados a partir de la regla de las mezclas. En la ecuación (2.1), el primer término, al lado izquierdo de la igualdad, corresponde al flujo de calor que abandona la aleación hacia los alrededores, el segundo término representa el flujo de calor generado durante el proceso de solidificación y el tercer término, ubicado del lado derecho de la igualdad, representa el flujo de calor que se acumula en la aleación.

Como ya se menciono antes, en el problema se supone que el principal mecanismo de transferencia de calor es por convección, lo que significa que el flux de calor puede ser definido mediante la ley de enfriamiento de Newton [20]:

$$\frac{dq}{dt} = -h(T - T_0) \quad (2.2)$$

donde h es el coeficiente de transferencia de calor, T es la temperatura de la aleación al tiempo t y T_0 es la temperatura del medio ambiente.

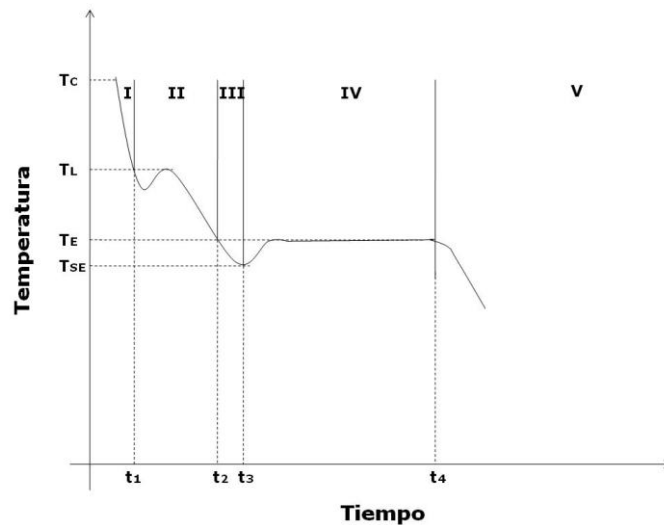


Figura 8. Curva de enfriamiento de un hierro colado de composición hipoeutéctica [26].

El balance global antes mencionado se aplica siguiendo la secuencia natural del proceso de enfriamiento y solidificación de la aleación, que en este trabajo se asume consta de cinco etapas [26]:

- I Enfriamiento de la fase líquida. Durante esta etapa, comprendida entre el inicio del proceso y el tiempo t_1 , la aleación transfiere hacia sus alrededores el calor asociado al sobrecalentamiento inicial con respecto a la temperatura del líquido (T_L).
- II Solidificación de la fase primaria. En esta etapa ocurre la nucleación y crecimiento de los granos equiaxiales dendríticos de la fase primaria γ y esta comprendida entre los intervalos de tiempo t_1 y t_2 , donde t_2 es el tiempo en el que se alcanza la temperatura eutéctica (T_E).
- III Solidificación simultánea de la fase primaria y el eutéctico. Esta etapa comprende el intervalo de tiempo t_2 y t_3 , donde t_3 indica el tiempo en el cual se ha alcanzado el subenfriamiento eutéctico máximo (T_{SE}). En esta etapa la fase primaria γ y el microconstituyente eutéctico γ -C solidifican simultáneamente.

IV Solidificación del microconstituyente eutéctico. En esta etapa ocurre únicamente la solidificación del eutéctico γ -C proveniente del líquido remanente y finaliza cuando la fracción sólida alcanza la unidad, esto es, cuando se alcanzado el tiempo t_4 .

V Enfriamiento de la fase sólida. Corresponde a los tiempos posteriores al fin de la solidificación.

A continuación se presenta la formulación del modelo, siguiendo las etapas descritas anteriormente.

Enfriamiento de la fase líquida

En esta primera etapa solo tiene lugar el enfriamiento de la fase líquida (disipación del calor sensible hacia los alrededores), razón por la cual es posible despreciar el término de generación de la ecuación (2.1), que después de combinarla con la ecuación (2.2), queda como:

$$-hA(T - T_0) = \rho_{ef}Cp_{ef}V \frac{dT}{dt} \quad (2.3)$$

La solución de la ecuación anterior se obtiene al despejar dT/dt y aplicando un método analítico o numérico, dependiendo de la complejidad de la expresión que resulta del despeje.

$$\frac{dT}{dt} = -\frac{hA(T - T_0)}{\rho_{ef}Cp_{ef}V} \quad (2.4)$$

Solidificación de la fase primaria

Durante esta etapa ocurre la solidificación de la fase primaria γ y por ello hay que considerar el término de generación (calor latente de solidificación) en el balance global:

$$A \frac{dq}{dt} + L_A \frac{df_A}{dt} = \rho_{ef}Cp_{ef}V \frac{dT}{dt} \quad (2.5)$$

donde:

$$\frac{dq}{dt} = -h(T - T_0)$$

$$L_A = V\Delta H_A$$

La variable ΔH_A representa el calor latente de fusión por unidad de volumen de la fase primaria. El historial térmico de esta etapa se obtiene despejando dT/dt de la ecuación (2.5) y resolviendo la expresión resultante ya sea por métodos analíticos o numéricos:

$$\frac{dT}{dt} = -\frac{hA(T - T_0)}{\rho_{ef}Cp_{ef}V} + \frac{\Delta H_A}{\rho_{ef}Cp_{ef}} \frac{df_A}{dt} \quad (2.6)$$

$$\frac{df_A}{dt} \cong \frac{\Delta f_A}{\Delta t} = \left[\frac{f_A^{i+1} - f_A^i}{\Delta t} \right]$$

El término de generación de calor es proporcionado por el modelo microscópico de cinética de solidificación, que en esta etapa se refiere a la evolución de la fracción sólida de la fase primaria f_A , que se describirá más adelante.

Solidificación simultanea de la fase primaria y el eutéctico

Una vez que el sistema ha alcanzado la temperatura eutéctica, T_E , inicia la solidificación simultanea de la fase primaria γ y el microconstituyente eutéctico γ -C, y concluye cuando se llega a la temperatura de máximo subenfriamiento eutéctico, T_{SE} . El balance de energía para esta etapa es:

$$A \frac{dq}{dt} + L_A \frac{df_A}{dt} + L_E \frac{df_E}{dt} = \rho_{ef}Cp_{ef}V \frac{dT}{dt} \quad (2.7)$$

donde:

$$L_A = V\Delta H_A$$

$$L_E = V\Delta H_E$$

$$\frac{dq}{dt} = -h(T - T_0)$$

Debido a que ocurre un cambio simultáneo de fases, se consideran dos términos de generación en el balance de energía: el término f_A que representa la contribución en la fracción sólida de la fase primaria y el término f_E que representa la contribución del microconstituyente eutéctico en la fracción sólida.

Para describir la evolución de la fracción sólida se emplean los modelos cinéticos de solidificación correspondientes a esta etapa. El historial térmico se obtiene al resolver la expresión (2.8), que resulta de despejar dT/dt de la ecuación (2.7).

$$\frac{dT}{dt} = -\frac{hA(T - T_0)}{\rho_{ef}Cp_{ef}V} + \frac{\Delta H_A}{\rho_{ef}Cp_{ef}} \frac{df_A}{dt} + \frac{\Delta H_E}{\rho_{ef}Cp_{ef}} \frac{df_E}{dt} \quad (2.8)$$

$$\frac{df_A}{dt} \cong \frac{\Delta f_A}{\Delta t} = \left[\frac{f_A^{i+1} - f_A^i}{\Delta t} \right]$$

$$\frac{df_E}{dt} \cong \frac{\Delta f_E}{\Delta t} = \left[\frac{f_E^{i+1} - f_E^i}{\Delta t} \right]$$

Solidificación del microconstituyente eutéctico

Después de que se ha alcanzado la temperatura de máximo subenfriamiento eutéctico, T_{SE} , la solidificación de la fase primaria concluye. Sin embargo, el microconstituyente eutéctico continúa formándose hasta que la fracción sólida alcanza un valor unitario, razón por la cual es considerado el término de generación en el balance de energía para esta etapa:

$$A \frac{dq}{dt} + L_E \frac{df_E}{dt} = \rho_{ef}Cp_{ef}V \frac{dT}{dt} \quad (2.9)$$

donde:

$$\frac{dq}{dt} = -h(T - T_0)$$

$$L_E = V\Delta H_E$$

En este caso, el modelo cinético de solidificación a considerar es el de solidificación equiaxial eutéctica. El historial térmico de esta etapa se obtiene al resolver la ecuación (2.10), que se obtiene del despeje de dT/dt de la ecuación (2.9).

$$\frac{dT}{dt} = -\frac{hA(T - T_0)}{\rho_{ef}Cp_{ef}V} + \frac{\Delta H_E}{\rho_{ef}Cp_{ef}} \frac{df_E}{dt} \quad (2.10)$$

$$\frac{df_E}{dt} \cong \frac{\Delta f_E}{\Delta t} = \left[\frac{f_E^{i+1} - f_E^i}{\Delta t} \right]$$

Enfriamiento de la fase sólida

Finalmente, cuando el sistema ha solidificado por completo, la aleación solo sufre un proceso de enfriamiento, por lo que el balance de energía en esta etapa queda expresado como:

$$A \frac{dq}{dt} = \rho_{ef}Cp_{ef}V \frac{dT}{dt} \quad (2.11)$$

donde:

$$\frac{dq}{dt} = -h(T - T_0)$$

Despejando dT/dt de la ecuación (2.11) y resolviendo la expresión resultante se obtiene el historial térmico para esta etapa.

$$\frac{dT}{dt} = -\frac{hA(T - T_0)}{\rho_{ef}Cp_{ef}V} \quad (2.12)$$

2.2.2. Modelo microscópico de cinética de solidificación

Como ya quedo establecido en el apartado 2.2.1, el enfriamiento y solidificación de un hierro colado es un proceso acoplado de transferencia de calor y de transformaciones de fase. Para lograr este acoplamiento pueden adoptarse dos metodologías: el método de calor específico y el método de calor latente. En este trabajo se ha elegido el método de calor latente para el acoplamiento ya que este método se basa en la cinética de nucleación y crecimiento, ajustándose mejor a la física del problema.

Nucleación

En la literatura se han encontrado dos modelos para describir la cinética de nucleación en los hierros colados: el modelo de solidificación instantánea y el modelo de solidificación continua. En el primer modelo se supone que la totalidad de los sitios de nucleación presentes por unidad de volumen de metal líquido se generan a una temperatura específica. En contraste, el modelo de nucleación continua asume que el número de núcleos formados es función de la temperatura [17]. En este trabajo se emplea el modelo de nucleación continua de Oldfield, que se basa en resultados experimentales, para describir tanto la nucleación de la fase primaria como la nucleación del microconstituyente eutéctico:

$$N_i = A_i \Delta T_i^2 \quad (2.13)$$

donde A_i es el coeficiente de nucleación, que se puede determinar experimentalmente, N_i el número de núcleos por unidad de volumen y ΔT_i el subenfriamiento local del líquido, determinado a partir de la temperatura de la aleación con respecto a la temperatura del líquidus T_L o a la de transformación eutéctica T_E , dependiendo de la fase que este solidificando:

$$\Delta T_A = T_L - T \quad (2.14)$$

$$\Delta T_E = T_E - T \quad (2.15)$$

Las temperaturas de equilibrio T_L y T_E están relacionadas con el diagrama de fases al que pertenece la aleación, que en este caso se trata de un grupo de aleaciones pertenecientes al sistema Fe-C-Si, para el cual existen reportadas en la literatura las siguientes relaciones [24]:

$$T_L = 1569 - 97.3(\%C + 0.25\%Si) \quad (2.16)$$

$$T_E = 1155 + 6.5\%Si \quad (2.17)$$

Para asegurar que el número de núcleos jamás decrezca, hay que tener en cuenta ciertas consideraciones cuando se emplea la ecuación (2.13): después de que la nucleación inicia a la temperatura del líquidus o a la temperatura eutéctica, esta continuara hasta que se presente el fenómeno de recalcancia y la velocidad de enfriamiento cambie de signo en el punto de subenfriamiento máximo. A partir de ese momento el número de núcleos se mantiene constante hasta que termina el proceso de solidificación [17, 25].

Crecimiento

En este trabajo se supone que tanto la austenita como el microconstituyente eutéctico solidifican bajo una estructura equiaxial. El modelo para estimar el crecimiento de estas fases asume que los granos crecen como esferas en el seno del líquido. La rapidez de crecimiento de estas esferas esta dada por la siguiente ecuación:

$$V_i = \frac{dR_i}{dt} = \mu_i \Delta T_i^2 \quad (2.18)$$

donde R_i , μ_i y ΔT_i son el radio de un grano esférico, el coeficiente de crecimiento y el subenfriamiento local del líquido para la fase i , respectivamente.

Fracción de sólido

Con la densidad de núcleos y la rapidez de crecimiento conocidas, es posible calcular la evolución de la fracción sólida a partir de la ecuación de Johnson-Mehl. Para emplear dicha ecuación deben tomarse en cuenta ciertas consideraciones, dependiendo de la etapa de solidificación que tenga lugar.

Cuando se alcanza la temperatura del líquido, comienza a solidificar la fase primaria, es decir, inicia la etapa II. Para describir la evolución de la fracción sólida durante esta etapa se emplea la ecuación de Johnson-Mehl, que se expresa como:

$$f_A = 1 - \exp(-f_A^{Ex}) \quad (2.19)$$

donde f_A es la fracción de austenita y f_A^{Ex} es la fracción sólida extendida, asociada al sólido de la fase primaria, que es calculada empleando la siguiente ecuación:

$$f_A^{Ex} = \frac{4}{3} \pi N_A R_A^3 \quad (2.20)$$

La densidad de núcleos N_A y el radio de los granos de la fase primaria R_A para un tiempo dado, dentro de la etapa II de solidificación, son calculados empleando las ecuaciones (2.13) y (2.18) respectivamente, tomando como subenfriamiento el valor obtenido a partir de la expresión (2.14).

En el momento que se alcanza la temperatura eutéctica, T_E , inicia la etapa III, relacionada al crecimiento simultaneo de los microconstituyentes primario y eutéctico. Durante esta etapa el sólido se representa por un conjunto de esferas sólidas de dos tipos diferentes; esferas sólidas de fase primaria y esferas solidas de microconstituyente eutéctico. Debido a estas características la ecuación de Johnson-Mehl debe ser modificada para que describa adecuadamente la evolución de la fracción solida en esta etapa.

Para realizar esta modificación se deriva la expresión que representa la fracción sólida extendida durante esta etapa, ecuación (2.21), con respecto al tiempo y se multiplica por el factor de empalmamiento $(1 - f_S)$ para tomar en cuenta la interacción que existe entre las esferas sólidas durante el crecimiento [26]:

$$f_S^{Ex} = \frac{4}{3}\pi N_A R_A^3 + \frac{4}{3}\pi N_E R_E^3 \quad (2.21)$$

$$\frac{df_S}{dt} = \left(4\pi N_A R_A^2 \frac{dR_A}{dt} + 4\pi N_E R_E^2 \frac{dR_E}{dt} \right) (1 - f_S) \quad (2.22)$$

Resolviendo analíticamente la ecuación anterior se obtiene:

$$f_S = 1 - \exp[-f_A^{Ex} - f_E^{Ex}] \quad (2.23)$$

El incremento de la fracción sólida, Δf_S , puede escribirse como la suma de dos contribuciones:

$$\Delta f_S = \Delta f_A + \Delta f_E \quad (2.24)$$

Cada una de las contribuciones puede ser calculada a partir de las expresiones siguientes, obtenidas a partir de la manipulación de la ecuación (2.23) [25, 26]:

$$\Delta f_A = \Delta f_A^{Ex} \cdot \exp(-f_A^{Ex} - f_E^{Ex}) \quad (2.25)$$

$$\Delta f_E = \Delta f_E^{Ex} \cdot \exp(-f_A^{Ex} - f_E^{Ex}) \quad (2.26)$$

Las ecuaciones (2.13) y (2.18) se emplean para determinar N y R respectivamente, tanto para la fase primaria como para el microconstituyente eutéctico.

Cuando se alcanza el máximo subenfriamiento eutéctico la etapa III termina y entonces el incremento de la fracción sólida es debido exclusivamente al crecimiento de los granos eutécticos, etapa IV. Durante

esta etapa el incremento en la fracción sólida se calcula mediante la ecuación siguiente:

$$\Delta f_S = \Delta f_E^{Ex} \cdot \exp(-f_A^{Ex} - f_E^{Ex}) \quad (2.27)$$

La etapa IV continua hasta que el valor de f_S alcanza la unidad, momento en el cual concluye la solidificación.

2.2.3. Modelo de cambio de volumen

El objetivo principal de este trabajo de tesis consiste en predecir los cambios de volumen asociados con el enfriamiento y solidificación de una pieza de hierro colado de composición hipoeutéctica o eutéctica conocida. El modelo empleado para predecir tales cambios parte del principio de conservación de la materia, es decir, la cantidad de hierro líquido que entra inicialmente al molde permanece constante durante todo el proceso de enfriamiento y solidificación.

Así pues, para un tiempo dado, el volumen del sistema se obtiene de la expresión siguiente:

$$V = \frac{M}{\rho_{ef}} \quad (2.28)$$

donde M y ρ_{ef} son la masa, que no cambia durante todo el proceso, y la densidad efectiva del sistema respectivamente. Por lo tanto, el cambio de volumen del sistema, en porciento, a un tiempo determinado es igual a:

$$\Delta V = \frac{V - V_i}{V_i} \times 100 \quad (2.29)$$

donde V_i es el volumen inicial en el sistema.

La densidad efectiva indicada en la ecuación (2.28) se considera como igual a la densidad promedio de la mezcla de las fases y/o

microconstituyentes presentes en el sistema, que en este caso consiste de líquido, austenita y del microconstituyente eutéctico:

$$\rho_{ef} = f_L \rho_L + f_A \rho_A + f_E \rho_E \quad (2.30)$$

donde f y ρ son la fracción sólida y la densidad y los subíndices L , A y E se refieren al líquido, austenita y al eutéctico, respectivamente. El microconstituyente eutéctico está constituido por las fases austenita y grafito, de modo que es necesario realizar cálculos adicionales para estimar su densidad. La densidad del microconstituyente eutéctico es:

$$\rho_E = \frac{M_E}{V_E} \quad (2.31)$$

donde M_E y V_E son la masa y el volumen del eutéctico respectivamente. Si se considera una masa M_E de eutéctico, el volumen de este es igual al volumen de la austenita, $f_A^w M_E / \rho_A$, mas el volumen del grafito, $f_G^w M_E / \rho_G$, presentes en dicha masa:

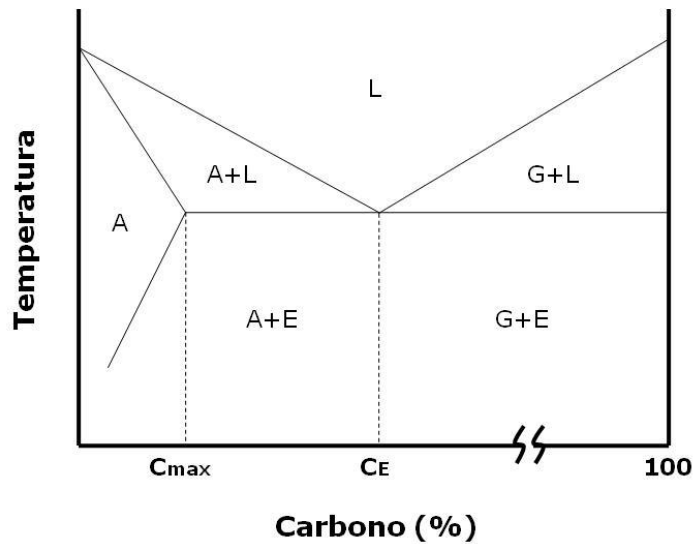
$$V_E = f_A^w M_E \frac{1}{\rho_A} + f_G^w M_E \frac{1}{\rho_G} \quad (2.32)$$

donde f_A^w y f_G^w son la fracción másica de la austenita y del grafito en el microconstituyente eutéctico respectivamente, obtenida del diagrama de fases, a partir de la regla de la palanca (ver Figura 9). Combinando las ecuaciones (2.31) y (2.32) y reacomodando términos, la densidad del eutéctico se expresa como:

$$\rho_E = \frac{\rho_A \rho_G}{f_A^w \rho_G + f_G^w \rho_A} \quad (2.33)$$

Por lo tanto, la densidad del sistema finalmente se obtiene de:

$$\rho_{ef} = f_L \rho_L + f_A \rho_A + f_E \left[\frac{\rho_A \rho_G}{f_A^w \rho_G + f_G^w \rho_A} \right] \quad (2.34)$$



$$f_A^w = \frac{100 - C_E}{100 - C_{max}}$$

$$f_G^w = 1 - f_A^w$$

Figura 9. Obtención de la fracción mássica de austenita, f_A^w , y grafito, f_G^w , en el microconstituyente eutéctico a partir de la regla de la palanca. C_{max} y C_E son el contenido mássimo de carbono en la austenita y el microconstituyente eutéctico respectivamente, y son función de la composición inicial ($C_{max} = 2.1-0.217\%Si$, $C_E = 4.26-0.3167\%Si$) [24].

La ecuación anterior junto con las ecuaciones (2.28) y (2.29) constituyen el modelo de cambio de volumen, y deben ser resueltas a cada instante del proceso de solidificación y enfriamiento. Sin embargo, antes de resolver el grupo de ecuaciones antes mencionado, se necesita conocer el valor de la densidad de cada una de las fases que constituyen el sistema y esto se logra a través del uso de correlaciones semi empíricas que están en función de la temperatura y, en algunos casos, de la composición química.

2.2.4. Segregación

Las temperaturas de equilibrio T_L y T_E involucradas en los modelos de nucleación y crecimiento están influenciadas por la concentración de soluto en el líquido. Por tal motivo, es necesario considerar el fenómeno de segregación de soluto durante la solidificación en el desarrollo del modelo [17, 25]. Asumiendo que existe mezclado completo en el líquido, la composición de este puede ser calculada aproximadamente usando la ecuación de Scheil, que en su forma diferencial se expresa como:

$$dC_L = C_L \frac{(1 - k_0)}{(1 - f_s)} df_s \quad (2.35)$$

Donde C_L es la concentración de soluto y k_0 es el coeficiente de partición. La concentración inicial del líquido se emplea como una condición inicial. La ecuación (2.35) se utiliza mientras la solidificación de la fase primaria tiene lugar ya que se considera que la segregación de carbono, C, y silicio, Si, solo ocurre durante esta etapa. Cuando inicia la solidificación del microconstituyente eutéctico, la segregación de soluto se supone como despreciable porque en este caso tiene lugar una redistribución neta entre la austenita y el grafito eutécticos.

Conocer la composición de la austenita también es necesario ya que, como se verá más adelante, esta información es empleada en el cálculo de la densidad de dicha fase. Para determinar la composición de la austenita se parte de un balance de materia que está dado por:

$$V\rho_{ef}C_i = Vf_L\rho_L C_L + Vf_A\rho_A C_A + Vf_E\rho_E C_E \quad (2.36)$$

Donde C representa la concentración de soluto y f la fracción sólida, mientras que los subíndices i , L , A y E se refieren a la condición inicial, líquido, austenita y eutéctico respectivamente. Despejando C_A de la ecuación (2.36) se obtiene:

$$C_A = \frac{\rho_{ef}C_i - f_L\rho_L C_L - f_E\rho_E C_E}{f_A\rho_A} \quad (2.37)$$

Ya que se está considerando que la segregación de soluto solo se da entre la austenita y la fase líquida, la expresión anterior queda finalmente como:

$$C_A = \frac{\rho_{ef}C_i - (1 - f_A)\rho_L C_L}{f_A\rho_A} \quad (2.38)$$

La composición de la austenita que forma parte del microconstituyente eutéctico se obtiene de la ecuación (2.39), que establece que la

composicion del microconstituyente eutéctico es igual a la suma ponderada de la composición de las fases que lo constituyen:

$$C_E = f_A^w C_{A-E} + f_G^w C_{G-E} \quad (2.39)$$

$$C_{A-E} = \frac{C_E - f_G^w C_{G-E}}{f_A^w} \quad (2.40)$$

donde C_E es la composición del eutéctico, que es igual a la composición del líquido remanente (debido a que en esta etapa se esta considerando una redistribución neta de soluto), f_A^w y f_G^w son la fracción másica de austenita y grafito en el eutéctico respectivamente, C_{A-E} es la composicion de la austenita perteneciente al eutéctico y C_{G-E} la composicion del grafito que forma parte del eutéctico.

2.3. Propiedades termofísicas y parámetros

La validez de las predicciones de cualquier modelo que pretenda describir un fenómeno depende en gran medida de la exactitud en los valores de los parámetros y propiedades termofísicas empleadas. Por ello, para garantizar un adecuado funcionamiento del modelo aquí elaborado, se ha hecho una revisión exhaustiva de los trabajos disponibles en la literatura, relacionados principalmente con el modelado del proceso de solidificación, a fin de establecer cuáles son los valores comúnmente usados para las propiedades y parámetros.

En la Tabla 1 se reportan los valores de las propiedades referentes al fenómeno de transferencia de calor, así como los parámetros involucrados en la cinética de solidificación y el fenómeno de segregación para un hierro gris, obtenidos de las referencias [17, 25, 27, 28]. En la misma tabla también se encuentran reportadas las correlaciones empleadas para calcular la densidad de las fases que componen al sistema.

Tabla 1. Propiedades termofísicas y parámetros considerados en el modelo.

Propiedad		Magnitud	Unidad
Propiedades involucradas en el modelo de de transferencia de calor			
Calor específico (Cp)	Fase líquida	750	J/KgK
	Fase sólida	830	
Calor latente (ΔH)	Austenita	1904 x 10 ⁶	J/m ³
	Eutéctico	2028 x 10 ⁶	
Coeficiente de transferencia de calor (h)		728 · t ^{-0.5}	J/m ² sK
Parámetros involucrados en modelo de cinética de solidificación			
Coeficiente de nucleación (A)	Austenita	5.00 x 10 ⁸	1/m ³ K ²
	Eutéctico	12.86 x 10 ⁶	
Coeficiente de crecimiento (μ)	Austenita	3.0 x 10 ⁻⁹	m/sK ²
	Eutéctico	1.6 x 10 ⁻⁸	
Propiedades involucradas en el modelo de cambio de volumen			
Densidad (ρ)	Fase líquida	1/(2.12245 x 10 ⁻⁵ ·T + 0.116286)	g/cm ³
	Austenita	Ver Apéndice A	
	Grafito	1/(1.11013 x 10 ⁻⁵ ·T + 0.474178)	
Parámetros involucrados en el modelo de segregación			
Coeficiente de partición (k ₀)	Grafito en austenita	0.48	-----
	Silicio en austenita	1.17	

Las expresiones usadas para calcular la densidad del metal líquido y del grafito, reportadas en la Tabla 1, muestran una dependencia con la temperatura y fueron obtenidas a partir de los datos reportados en la referencia [19]. Aun cuando se reconoce que existe una dependencia de la densidad del metal líquido con la temperatura y la composición química, no se considera el efecto de este último parámetro en la expresión debido a la escasez de datos experimentales disponibles en la literatura. El cálculo de la densidad de la austenita representa un caso especial respecto a las otras dos fases debido nuevamente a la falta de datos disponibles en la literatura. Para esta fase, la densidad se obtiene a partir de un modelo que se basa en mediciones del parámetro de red [19] y que considera los efectos de la composición y la temperatura. Dicho modelo se describe detalladamente en el Apéndice A.

Por otra parte, las características del sistema y las suposiciones hechas en la elaboración del modelo son similares a las consideradas en la regla de

Chvorinov. Por lo tanto, en este trabajo se supone como valido hacer una aproximación del coeficiente de transferencia de calor a partir de dicha regla. De acuerdo con la regla de Chvorinov, el flux de calor es igual a:

$$\frac{dq}{dt} = \frac{\sqrt{K_M C p_M \rho_M}}{\sqrt{\pi t}} (T - T_0) \quad (2.41)$$

donde K_M es la conductividad térmica, $C p_M$ el calor especifico y ρ_M del molde. Recuérdense además que anteriormente se estableció que el flux de calor del sistema en la interface metal-molde esta dado por la ley de enfriamiento de Newton:

$$\frac{dq}{dt} = h(T - T_0) \quad (2.42)$$

Igualando las ecuaciones (2.41) y (2.42) y despejando h se obtiene la ecuación (2.43), que muestra una dependencia del valor de h con el tiempo.

$$h = \frac{\sqrt{K_M C p_M \rho_M}}{\sqrt{\pi}} \frac{1}{\sqrt{t}} \quad (2.43)$$

En la Tabla 1 se muestra la expresión final para calcular el valor de h , obtenida después de sustituir los términos de la ecuación anterior por los valores de las propiedades del molde, mostradas en la Tabla 2.

Tabla 2. Propiedades termofisicas del molde de arena [17, 27].

Propiedad	Magnitud	Unidad
Conductividad térmica (K)	0.9	J/msK
Calor especifico (Cp)	1193	J/KgK
Densidad (ρ)	1550	Kg/m ³

CAPÍTULO 3. SOLUCIÓN DEL MODELO

El modelo desarrollado en el capítulo anterior consta de una serie de ecuaciones referentes a la transferencia de calor, cinética de solidificación, cambio de volumen y segregación. Estas ecuaciones fueron acopladas en un algoritmo de cálculo que posteriormente fue traducido al lenguaje de programación de alto nivel Python 2. A continuación se describe la metodología empleada en el desarrollo del algoritmo de cálculo, así como su implementación computacional. Además, se enuncian los casos de estudio abordados con el modelo, indicando cuales fueron los criterios adoptados para la selección de dichos casos.

3.1. Método de solución

La solución del grupo de ecuaciones desarrolladas en el Capítulo 2 ofrece información sobre el comportamiento del sistema durante el proceso de solidificación y enfriamiento. Algunas de estas ecuaciones se emplean directamente mientras que otras tienen que ser resueltas antes de ser utilizadas en el modelo. Dentro de las ecuaciones que deben ser resueltas están las que describen el historial térmico en las cinco etapas de solidificación y enfriamiento así como la ecuación usada para calcular la rapidez de crecimiento de la austenita y el microconstituyente eutéctico. Estas ecuaciones entran en la clasificación de ecuaciones diferenciales de primer orden y en el presente trabajo se resolvieron empleando el método de Euler.

En el caso de las ecuaciones que describen el historial térmico, el método de Euler consiste en predecir un valor de temperatura T a partir la rapidez de enfriamiento dT/dt mediante una extrapolación lineal sobre un intervalo de tiempo Δt . Esto se expresa matemáticamente mediante la siguiente ecuación:

$$T^{t+\Delta t} = T^t + \left(\frac{dT}{dt}\right) \cdot \Delta t \quad (3.1)$$

donde $T^{t+\Delta t}$ representa la temperatura futura, T^t es la temperatura presente, dT/dt es la rapidez de enfriamiento, que adquiere diferentes formas según la etapa de solidificación y enfriamiento, y Δt representa el incremento de tiempo.

De manera análoga, la solución de la ecuación que describe la rapidez de crecimiento, de acuerdo con el método de Euler, está dada por:

$$R^{t+\Delta t} = R^t + V \cdot \Delta t \quad (3.2)$$

donde $R^{t+\Delta t}$ es el radio futuro de un grano de radio esférico, de austenita o microconstituyente eutéctico según sea el caso, R^t es el radio presente de un grano y V representa la rapidez de crecimiento del grano.

3.2. Algoritmo de cálculo

El modelo global que describe la solidificación y enfriamiento de un hierro colado, desarrollado en el Capítulo 2, consta de cuatro modelos: un modelo de transferencia de calor, un modelo de cinética de solidificación, un modelo de cambio de volumen y un modelo de segregación. Todos estos modelos deben acoplarse siguiendo la secuencia natural del proceso de enfriamiento y solidificación de la aleación bajo estudio y guardando un orden de solución entre ellos, ya que los resultados de algunos modelos son necesarios en la solución de los otros.

Tomando en cuenta lo anterior, se adoptó la siguiente metodología para llevar a cabo la solución del modelo global:

- a) Definición de propiedades y parámetros e inicialización del sistema. En este primer paso se establecen los valores de los parámetros cinéticos y propiedades termofísicas que serán empleados en la solución de los

cuatro modelos que constituyen el modelo global. Además se establecen los parámetros de operación del sistema (temperatura de colada, temperatura ambiente y composición de la aleación) y se indica el estado inicial del mismo.

- b) Solución del modelo global durante el enfriamiento de la fase líquida. Durante el enfriamiento de la fase líquida no existe ningún cambio de fase ni redistribución de soluto, por lo tanto en esta etapa solo hay que resolver el modelo de transferencia de calor y el modelo de cambio de volumen. Como el modelo de cambio de volumen depende de los resultados del modelo de transferencia de calor, para su solución es necesario resolver primero a este último de acuerdo con la metodología expuesta en el apartado 3.1. Una vez que el modelo global se ha resuelto para un tiempo dado t , se despliegan resultados y nuevamente se resuelve el modelo global para el tiempo $t+\Delta t$.

La solución del modelo global, de acuerdo con las características expuestas en este inciso, continua hasta que inicia la solidificación (a la temperatura T_L o T_E , dependiendo de la composición química de la aleación).

- c) Solución del modelo global durante el proceso de solidificación. En este punto de la metodología el modelo se resuelve para las etapas II, III y IV del proceso de solidificación y enfriamiento. Los modelos transferencia de calor, cinética de solidificación, cambio de volumen y segregación deben ser resueltos. La secuencia de solución de los modelos consiste en: resolver el modelo de cinética de solidificación y de transferencia de calor, con los resultados obtenidos se resuelve el modelo de cambio de volumen y, finalmente, se resuelve el modelo de segregación. Después de resolver los modelos se despliegan los resultados y se repite la secuencia de solución ya descrita para el siguiente paso de cálculo. Este procedimiento continúa hasta que la aleación a solidificado por completo, es decir, cuando la fracción sólida

alcanza la unidad. Cabe mencionar que la solución del modelo global para un tiempo dado t se obtiene partiendo de las condiciones a las que se encontraba sistema al tiempo $t-\Delta t$.

- d) Solución del modelo global durante el enfriamiento de la fase sólida. Esta etapa del proceso de enfriamiento y solidificación es muy similar a la a la etapa I, de modo que se sigue la misma metodología expuesta en el inciso b), pero tomando en cuenta las propiedades de la austenita y el microconstituyente eutéctico presentes. En este caso los cálculos se llevan a cabo hasta que se alcanza una temperatura T_F .

En el Apéndice B se muestra el diagrama de flujo que representa la metodología anteriormente descrita, a partir del cual se genero el programa de cómputo.

Por otra parte, en el Apéndice C se muestra el programa de cómputo desarrollado a partir de la metodología de solución ya expuesta (algoritmo de cálculo). El programa de cómputo fue escrito en el lenguaje de programación interpretado de alto nivel Python 2 y su ejecución se realizo empleando el intérprete en su versión 2.7. Aun cuando Python es un lenguaje de programación multiparadigma, es decir que soporta varias técnicas de programación, el programa de computo se desarrollo empleando la técnica de programación estructurada, pues el número de líneas de código fue relativamente pequeño, como para considerar el uso de técnicas más avanzadas, como lo son la programación modular o la programación orientada a objetos.

3.3. Diseño de las simulaciones: casos de estudio

El modelo se ha desarrollado haciendo referencia a aleaciones de hierro de composición hipoeutectica o eutéctica que pertenecen al sistema Fe-C-Si, pero sin definir un tipo de hierro en especifico (hierro gris, dúctil, blanco o

maleable). Esto es porque el modelo es capaz de simular el proceso de solidificación y enfriamiento de cualquier tipo de hierro cuya composición no sea mayor a la eutéctica, solo basta ingresar en dicho modelo las propiedades y parámetros adecuados. Sin embargo, como ya se expuso en el marco teórico, de los hierros colados existentes, los que presentan un comportamiento particular en cuanto a los cambios de volumen durante su solidificación son en los que tiene lugar la precipitación de grafito, es decir, los hierros grises y dúctiles.

Por tal motivo en este trabajo se ha elegido en particular a los hierros grises para llevar a cabo una serie de simulaciones que permitan establecer la influencia de los parámetros del proceso sobre los cambios de volumen durante la solidificación y enfriamiento.

Teniendo en cuenta que el sistema bajo estudio corresponde a un cilindro de hierro gris confinado en un molde de arena que inicialmente se encuentra en líquido, los parámetros de proceso que serán considerados en este trabajo son:

- Temperatura de colada. Esto es, la temperatura del hierro líquido al inicio del proceso.
- Modulo de enfriamiento. En las simulaciones se asume que el cilindro se comporta como un cuerpo semi infinito. Por lo tanto, este parámetro se estudia a través de la variación del radio r de la pieza, ya que el modulo de enfriamiento M depende solo de r ($M = r/2$).
- Composición química. Ya que se están considerando hierros pertenecientes al sistema Fe-C-Si, solo se analiza la influencia del C y Si. En hierros de composición eutéctica (hierros con carbono equivalente, CE , igual a $4.26 = \%C - 0.3167\%Si$) se estudia la relación C/Si. Cabe mencionar que tanto en el estudio de este parámetro como en los otros, la composición química se establece según el rango de

composición en los que normalmente se encuentran el C y Si en los hierros grises, que de acuerdo con la literatura [29] es: $3.0 \leq \%C \leq 3.5$ y $1.8 \leq \%Si \leq 2.4$.

- Inoculación. Se expresa a través de la constante de nucleación A del microconstituyente eutéctico. Un valor grande de A se refiere a una fuerte inoculación, en tanto que un valor pequeño de A indica una inoculación pobre.

En la tabla siguiente se muestran las características de simulaciones hechas a fin de estudiar la influencia de los parámetros anteriormente citados.

Tabla 3. Casos de estudio elegidos para estudiar la influencia de los parámetros de proceso sobre los cambios de volumen en los hierros grises durante su solidificación.

Dimensiones (m)			Composición (% peso)			Temperatura de colada (°C)	Constante de nucleación eutéctica ($m^{-3}K^{-2}$)
D	L	M	C	Si	CE		
Influencia de la temperatura de colada							
0.04	0.10	0.010	3.49	2.4	4.26	1400 1350 1300	Valor propuesto en la Tabla 1
Influencia del modulo de enfriamiento							
0.04 0.05 0.06	0.10	0.0100 0.0125 0.0150	3.49	2.4	4.26	1400	Valor propuesto en la Tabla 1
Influencia de la composición química							
0.04	0.10	0.01	3.00 3.00 3.30 3.60 3.69 3.59 3.49	1.8 2.1 2.4 1.8 2.1 2.4	3.45 3.53 3.60 3.45 3.75 4.05	1400	Valor propuesto en la Tabla 1
Influencia de la inoculación							
0.04	0.10	0.01	3.49	2.4	4.26	1400	10.0×10^4 10.0×10^5 10.0×10^6 10.0×10^7

CAPÍTULO 4. RESULTADOS Y DISCUSIÓN

Se llevaron a cabo la serie de simulaciones propuestas en la Tabla 3 y los resultados obtenidos fueron graficados y agrupados a fin de facilitar su análisis. A continuación se presentan dichos resultados y se hace un extenso análisis de los mismos con objeto de establecer la manera en que los parámetros de proceso considerados en este trabajo afectan el cambio de volumen de los hierros grises durante su solidificación y enfriamiento.

4.1. Influencia de la temperatura de colada

En la Figura 10 se muestra la evolución del sistema bajo estudio a diferentes temperaturas de colada, manteniendo el resto de los parámetros constantes. Para el estudio de este parámetro se considero una aleación de de composición eutéctica para facilitar el análisis.

Las Figuras 10 (a) y 10 (b) muestran que la temperatura de colada T_C tiene un efecto importante sobre el inicio de la solidificación ya que se observa que el sistema con la mayor temperatura de colada (1400 °C) es el que tarda más en iniciar dicho proceso, mientras que el sistema con la menor temperatura de colada (1300 °C) es el primero en iniciar su solidificación. Esto se debe a que una mayor temperatura de colada representa una mayor cantidad de energía (calor) que debe ser expulsada por el sistema antes llegar a la temperatura de solidificación, en este caso la temperatura eutéctica. Sin embargo, el proceso de solidificación parece no estar influenciado por la temperatura de colada, ya que de acuerdo con las Figuras 10 (a) y 10 (b), el intervalo de solidificación en los tres valores de T_C , 1300, 1350 y 1400 °C, es prácticamente el mismo.

La influencia de la temperatura de colada sobre el cambio de volumen es mayor que la observada sobre la evolución térmica y la cinética de solidificación, pues de acuerdo con la Figuras 10 (d) existe una contracción

muy pronunciada de metal líquido cuando la temperatura de colada es elevada. Lo anterior se debe a que el cambio de temperatura que se produce en el sistema una vez terminado el enfriamiento del metal líquido ($T_C - T_E$) es mayor cuanto más elevada es la temperatura de colada y en consecuencia el cambio en la densidad del sistema es mayor, produciéndose así una mayor contracción.

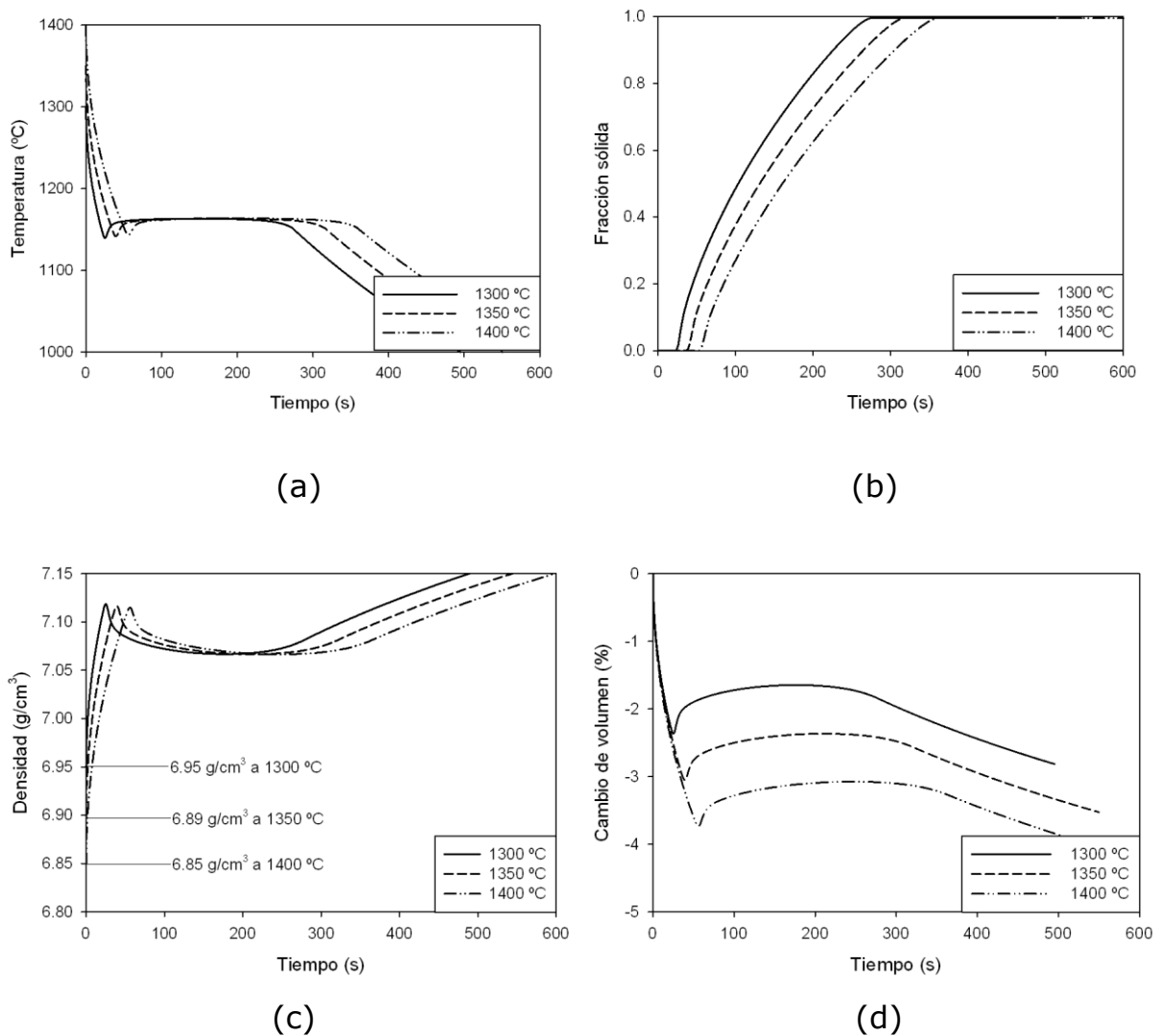


Figura 10. Evolución del sistema bajo estudio para tres diferentes temperaturas de colada y manteniendo el resto de parámetros de proceso constantes: (a) curvas de enfriamiento, (b) fracción sólida, (c) densidad y (d) cambio de volumen en porcentaje.

Una vez que inicia la solidificación de la aleación, se produce un cambio de volumen positivo, es decir, la aleación comienza a expandirse. Esto es porque el único microconstituyente que está solidificándose es el eutéctico, que posee una menor densidad que la del líquido del que procede debido a la precipitación de grafito. Así como ocurrió con el historial térmico y con la evolución de la fracción sólida, no existe influencia alguna de la temperatura de colada sobre los cambios de volumen de la aleación durante el proceso de solidificación, pues como se observa en la Figura 10 (d), los cambios relativos de volumen (cambio de volumen entre el inicio y el fin de la solidificación) durante esta etapa son similares en las tres condiciones de colada.

4.2. Influencia del módulo de enfriamiento

Para el análisis de este parámetro se varió el radio de la pieza que compone al sistema, mientras que su longitud permaneció constante. Nuevamente, con objeto de hacer más fácil el análisis, se considera una aleación de composición eutéctica (ver Tabla 3).

El módulo de enfriamiento es la razón que existe entre el volumen de la pieza y la superficie que la limita y que participa en la extracción de calor ($M = V/A$). Cuanto mayor sea el módulo, mayor será el tiempo de solidificación, debido a que un valor grande implica una superficie de extracción de calor pequeña en relación al valor por ella encerrado. Esto es evidente en la Figura 11 (a), donde se observa que el sistema bajo estudio tarda más en enfriarse para el caso del mayor módulo de enfriamiento ($M = 0.0125 \text{ m}$). En la misma figura se observa que el incremento en M provoca una disminución en el subenfriamiento del metal líquido y produce un ligero desplazamiento de la curva de enfriamiento hacia la derecha durante esta etapa. Además, se observa una mayor influencia de M sobre

la reacción eutéctica que sobre el enfriamiento del metal líquido, pues un incremento en el valor de este parámetro provoca un aumento más significativo en el tiempo de solidificación que en el tiempo de enfriamiento del metal líquido. Este comportamiento se explica al observar la Figura 11 (b), ya que en ella se nota que la curva que describe la evolución de la fracción sólida tiene una pendiente menos pronunciada cuanto mayor es el valor de M , esto es, la rapidez de solidificación disminuye con el aumento de M .

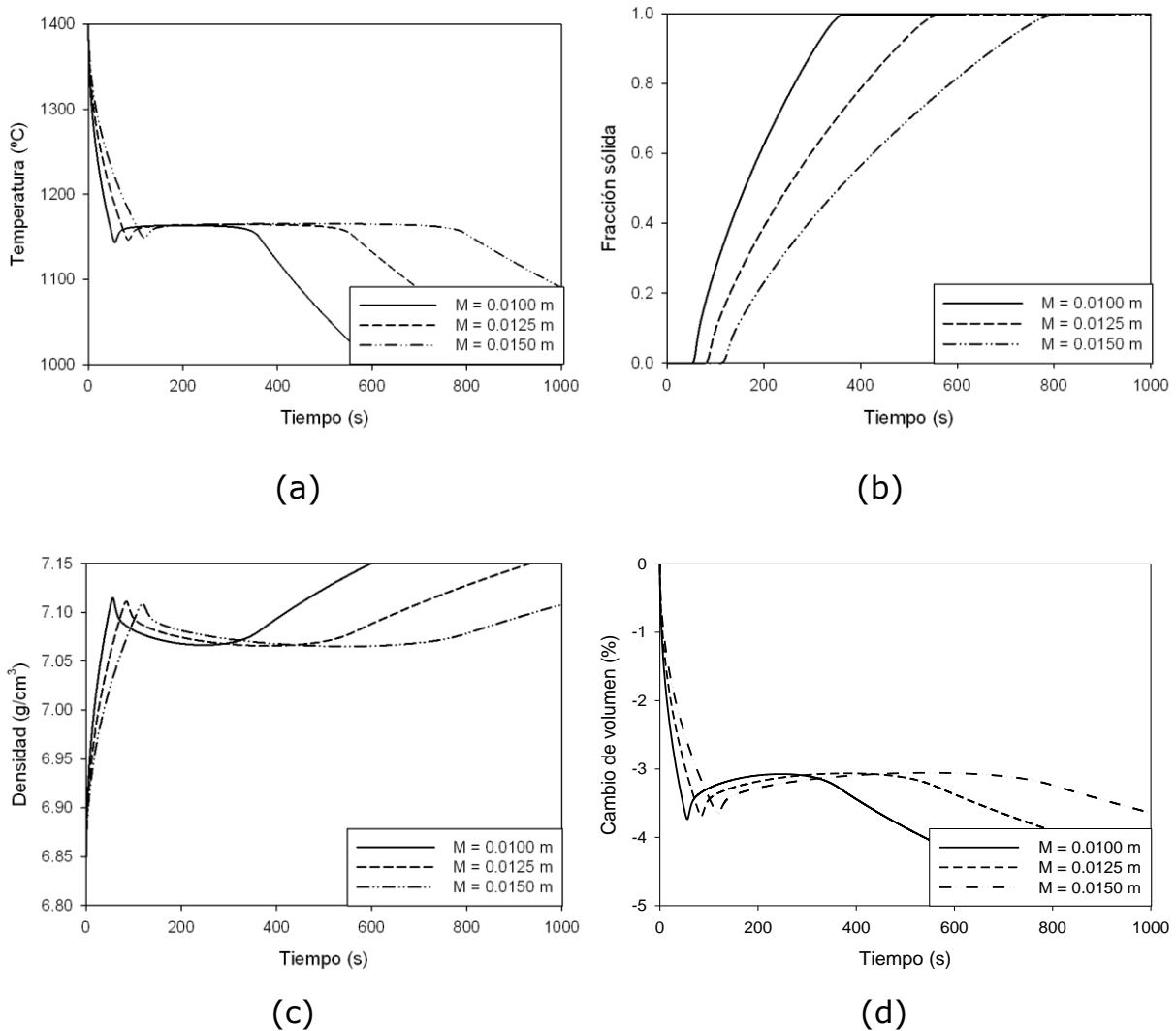


Figura 11. Evolución del sistema bajo estudio para tres diferentes módulos de enfriamiento y manteniendo el resto de parámetros de proceso constantes: (a) curvas de enfriamiento, (b) fracción sólida, (c) densidad y (d) cambio de volumen en porcentaje.

La Figura 11 (c) muestra que un incremento en el valor de M da lugar a una ligera disminución en la densidad máxima del metal líquido, que coincide con el punto de máximo subenfriamiento del sistema. Esta disminución en la densidad se ve reflejada en la contracción que sufre el metal líquido, pues de acuerdo con lo mostrado en la Figura 11 (d), la contracción líquida es ligeramente más pequeña cuanto mayor es el módulo de enfriamiento.

Por otra parte, cuando el líquido comienza a solidificar, se observa que el sistema comienza a expandirse como resultado de la precipitación del grafito que compone al microconstituyente eutéctico. Los resultados obtenidos muestran que el módulo de enfriamiento tiene una pequeña influencia sobre la magnitud de la expansión antes referida, ya que de acuerdo con la Figura 11 (d), la expansión es más pronunciada en el caso que se tiene el menor módulo de enfriamiento. La razón del comportamiento anterior está en que, en el caso de los tres módulos de enfriamiento, el valor neto de cambio de volumen, al momento que se alcanza la máxima expansión, es prácticamente el mismo, pero no así el valor de cambio de volumen al inicio de la solidificación, pues como ya se comentó, existe una mayor contracción líquida con valores pequeños en el módulo de solidificación, como resultado del subenfriamiento máximo alcanzado, lo que finalmente da lugar a un mayor intervalo de expansión durante la reacción eutéctica.

Una vez concluida la solidificación, el sistema comienza a contraerse como resultado del enfriamiento del metal sólido. La sección de la curva que describe esta contracción tiene una pendiente menos pronunciada en el caso que se empleó el módulo de enfriamiento más grande y esto está relacionado con la dificultad del sistema para expulsar su energía interna (calor) hacia los alrededores, es decir, el sistema tarda más en enfriarse y por lo tanto los cambios en la densidad de este son menos pronunciados.

4.3. Influencia de la composición química

El estudio de la influencia del C y Si sobre los cambios de volumen de los hierros grises, se llevo a cabo considerando dos casos generales: hierros de composición hipoeutéctica y hierros de composición eutéctica. En el primer caso se varió el contenido de C y Si procurando no sobrepasar el punto eutéctico, es decir, se establecieron composiciones que satisficieran la condición siguiente:

$$\%C + 0.3167\%Si < 4.26 \quad (4.1)$$

Por otra parte, en el caso de los hierros de composición eutéctica se eligieron combinaciones de composiciones que satisficieran la siguiente igualdad:

$$4.26 = \%C + 0.3167\%Si \quad (4.2)$$

En la tabla Tabla 3 se muestran la serie de composiciones elegidas para el estudio de este parámetro.

4.3.1. Hierros hipoeutécticos

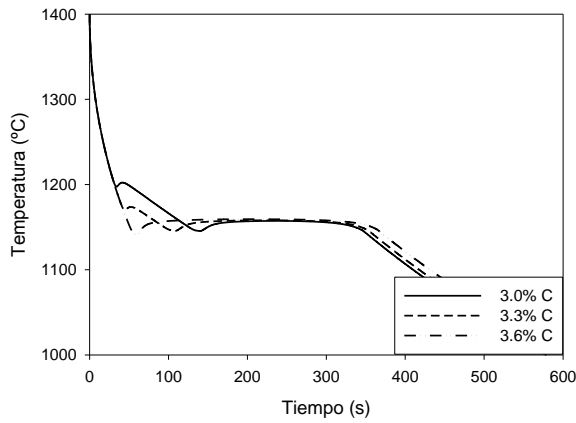
En la Figura 12 se muestra la evolución del sistema para diferentes contenidos de C, mientras que en la Figura 13 se muestra también la evolución del sistema, pero considerando únicamente la influencia del contenido de Si.

Al revisar los historiales térmicos mostrados en las Figuras 12 (a) y 13 (a) se observa que un incremento en el contenido de C o de Si provoca una disminución en la temperatura de inicio de la solidificación de la fase primaria, T_L , siendo los sistemas donde se vario el contenido de C los que presentaron esta tendencia de manera más remarcada. Como resultado directo de la disminución de T_L , la cantidad de microconstituyente eutéctico

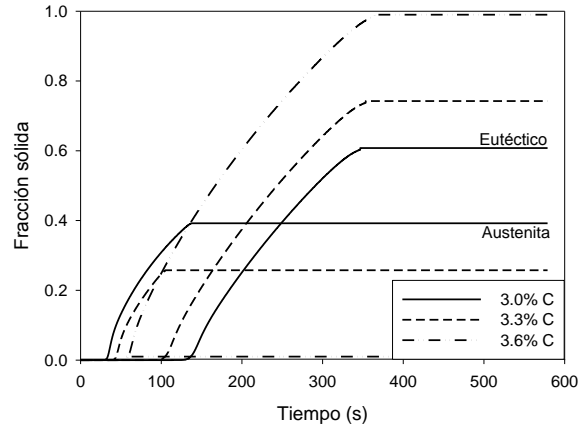
formado durante la solidificación aumenta, tal como se puede observar en las Figuras 12 (b) y 13 (b).

En las Figuras 12 (c) y 13 (c) se observa que la densidad del sistema aumenta durante el enfriamiento del metal líquido y durante la precipitación de la austenita, pero una vez iniciada la reacción eutéctica, la densidad en el sistema comienza a disminuir levemente, como resultado de la precipitación de grafito que pertenece al eutéctico. Una vez concluida la solidificación del metal, la densidad del sistema comienza a aumentar de nuevo. En las figuras antes mencionadas se observa que la densidad del sistema disminuye cuanto mayor es el contenido de C o de Si, esto se debe a que un aumento en la composición provoca que la cantidad de eutéctico en el sistema sea mayor. El efecto anterior es más pronunciado cuando se varía el contenido de C que cuando se varía el contenido de Si.

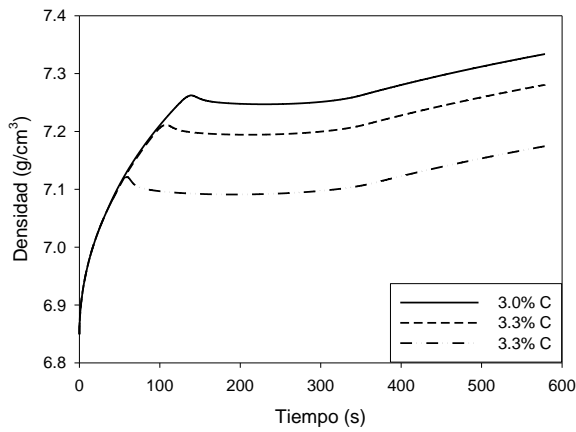
Al observar las Figuras 12 (d) y 13 (d) se advierte que la contracción en el sistema durante el enfriamiento del metal líquido y durante la precipitación de la fase primaria presenta la misma tendencia sin importar el contenido de C o Si, sin embargo, la contracción máxima alcanzada momentos antes de iniciar la reacción eutéctica es mayor en el caso que se emplean valores pequeños de C o Si, debido a que la proporción de austenita/líquido es mayor en estas condiciones, siendo la austenita una fase significativamente más densa que el líquido del que procede. Durante la reacción eutéctica se observa una pequeña expansión en el sistema debida tanto a la recalescencia como a la precipitación del microconstituyente eutéctico, que posee una densidad menor comparada con la fase líquida y la austenita. En las Figuras 12 (d) y 13 (d) se observa que esta expansión es ligeramente mayor a medida que aumenta el contenido de C o Si, esto debido a que al aumentar el valor de estos parámetros existe una mayor fracción de eutéctico precipitado. Adviértase que la variación de C provoca cambios más pronunciados sobre el sistema en lo que a expansión se refiere en comparación con la variación de Si.



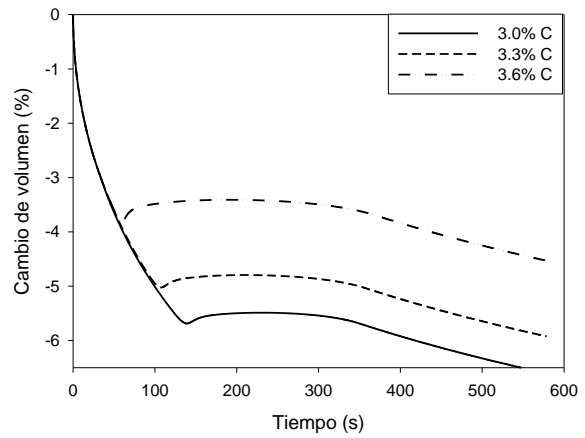
(a)



(b)



(c)



(d)

Figura 12. Evolución del sistema bajo estudio para tres diferentes contenidos de C y con el resto de parámetros de proceso constantes: (a) curvas de enfriamiento, (b) fracción sólida, (c) densidad y (d) cambio de volumen en porcentaje.

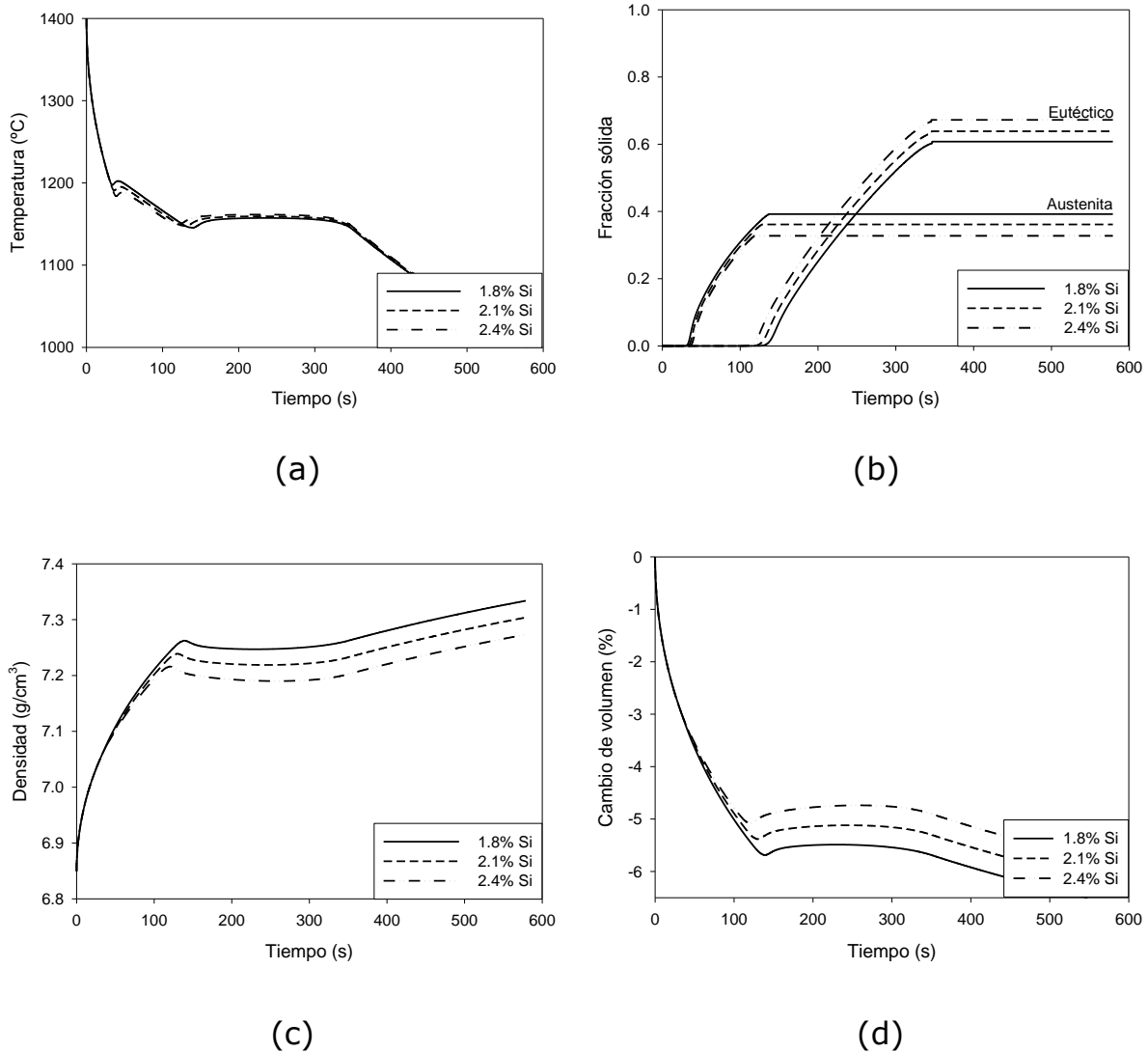


Figura 13. Evolución del sistema bajo estudio para tres diferentes contenidos de Si y manteniendo el resto de parámetros del proceso constantes: (a) curvas de enfriamiento, (b) fracción sólida, (c) densidad y (d) cambio de volumen en porcentaje.

4.3.2. Hierros eutécticos

Como lo muestra la expresión (4.2), en sistemas Fe-C-Si no existe una composición única con la cual se puede obtener hierros donde el único microconstituyente sea el eutéctico, todas las combinaciones de composición que satisfagan la igualdad enunciada en la expresión mencionada anteriormente darán por resultado una aleación de

composición eutéctica. En base a lo anterior se propusieron tres diferentes composiciones en las que se garantiza la obtención de hierros eutécticos, composiciones que guardan las siguientes relaciones C/Si: 1.45, 1.70 y 2.05. A continuación se analiza la influencia de la relación C/Si sobre el comportamiento del sistema.

En las Figuras 14 (a) y 14 (b) se muestra que la relación C/Si no tiene ningún efecto importante sobre el comportamiento del sistema, en lo que a transferencia de calor y cinética de solidificación se refiere. Sin embargo, se observa que la relación C/Si influye de manera importante sobre la densidad del sistema, pues como se muestra en la Figura 14 (c), con la disminución de la relación C/Si existe también una disminución en la densidad del sistema durante la reacción eutéctica. Esta disminución en la densidad se ve reflejada directamente en los cambios de volumen del sistema, ya que de acuerdo con la Figura 14 (d) cuanto menor es la densidad del sistema mayor es la expansión que tiene lugar durante la formación del microconstituyente eutéctico.

En la Figura 14 (d) se sobrepuso la curva que define la evolución de la fracción sólida a fin de identificar el punto de inicio y fin de la solidificación. Al realizar lo anterior, se observó lo siguiente:

- La contracción del metal líquido es la misma en las tres relaciones C/Si estudiadas. Esto porque el historial térmico fue el mismo en las tres relaciones C/Si estudiadas y debido también a que la relación utilizada para estimar la densidad del metal líquido en este trabajo no toma en cuenta el efecto de la composición química.
- En las tres relaciones C/Si se observa que el volumen del sistema es mayor al final de la solidificación comparado con el volumen al inicio de este proceso. Sin embargo el mayor volumen, es decir la mayor expansión, se obtuvo con la menor relación C/Si.

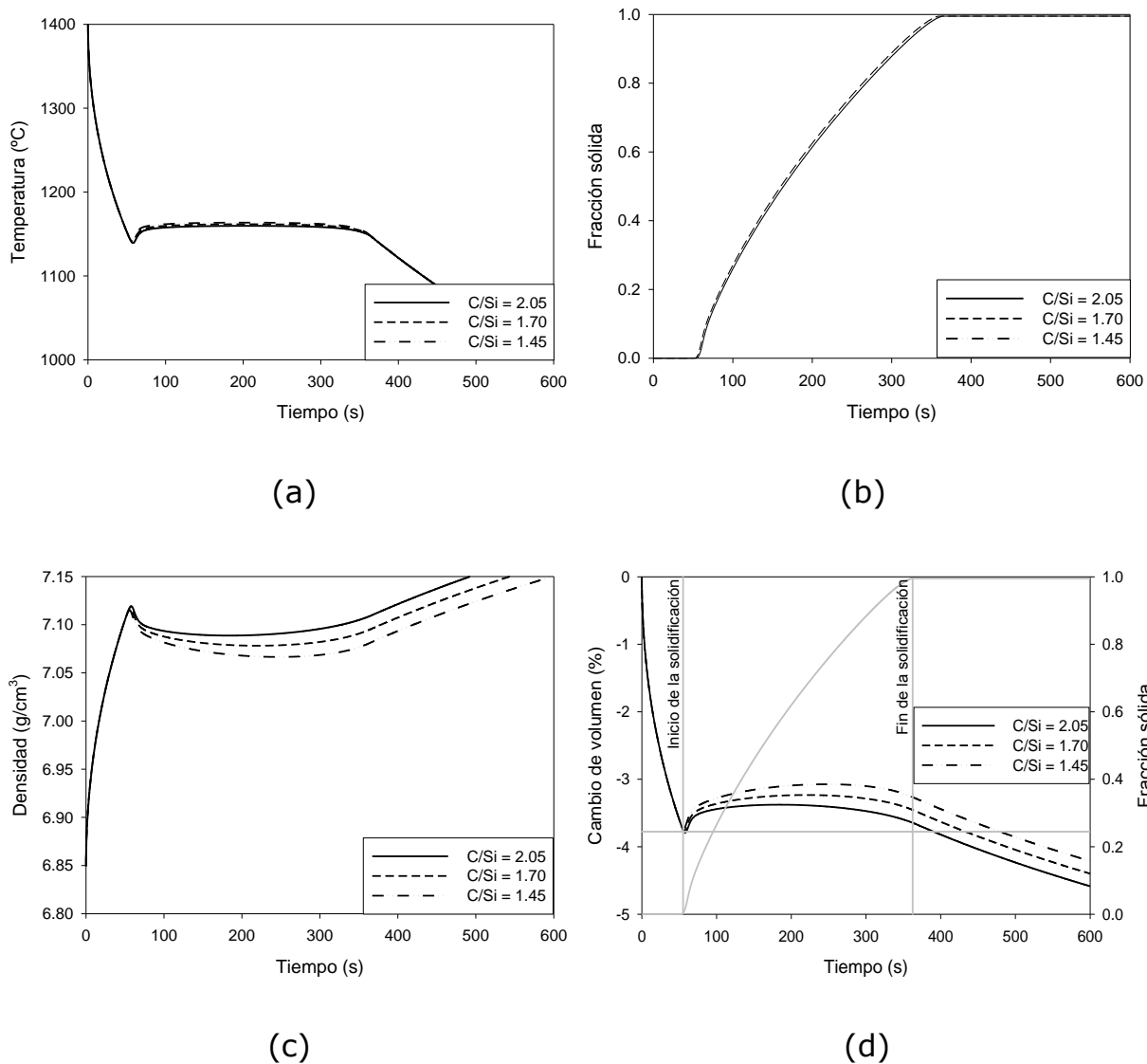


Figura 14. Evolución del sistema bajo estudio para tres diferentes relaciones C/Si y manteniendo el resto de parámetros del proceso constantes: (a) curvas de enfriamiento, (b) fracción sólida, (c) densidad y (d) cambio de volumen en por ciento.

Valores pequeños en la relación C/Si indican que el contenido de Si es mayor que el contenido de C en el hierro. Por ello, que ocurra una mayor expansión en el sistema con valores pequeños de C/Si se debe a la presencia de elevadas cantidades de Si, mismas que provocan una disminución en la densidad de la austenita que forma parte del microconstituyente eutéctico. Así pues, una disminución en la densidad de

la austenita aunada a la precipitación de grafito provoca que el sistema se expanda durante la reacción eutéctica. El comportamiento anterior indica que el contenido de Si es mucho más importante en la expansión del hierro que el contenido de C, situación que en un principio puede parecer equivocada si se tiene en cuenta que un contenido mayor de C se traduce en una mayor cantidad de grafito precipitado. Sin embargo si se analizan las Tablas 4 y 5 se puede notar que el efecto en la variación de C y Si sobre la fracción másica de austenita, f_A^w , y grafito, f_G^w , que forman parte del eutéctico es despreciable comparado con el efecto producido sobre la densidad de la austenita.

Tabla 4. Variación de la fracción másica de austenita y grafito en el eutéctico con la composición química.

%C	%Si	CE	C_{max}	C_E	f_A^w	f_G^w
3.69	1.80	4.26	1.71	3.69	0.9799	0.0201
3.66	1.90	4.26	1.69	3.66	0.9800	0.0200
3.63	2.00	4.26	1.67	3.63	0.9801	0.0199
3.59	2.10	4.26	1.64	3.59	0.9802	0.0198
3.56	2.20	4.26	1.62	3.56	0.9803	0.0197
3.53	2.30	4.26	1.60	3.53	0.9804	0.0196
3.50	2.40	4.26	1.58	3.50	0.9805	0.0195

Tabla 5. Variación de la densidad de la austenita con la composición química

%C	%Si	CE	Densidad (Kg/m ³)
3.69	1.80	4.26	7388.193
3.66	1.90	4.26	7380.785
3.63	2.00	4.26	7373.397
3.59	2.10	4.26	7366.028
3.56	2.20	4.26	7358.679
3.53	2.30	4.26	7351.349
3.50	2.40	4.26	7344.039

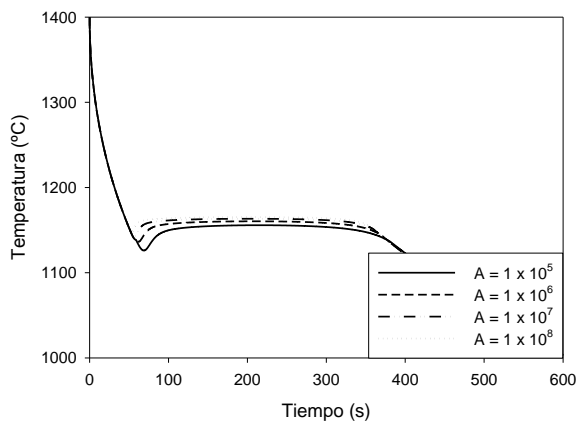
4.4. Influencia de la inoculación

La inoculación afecta el número de centros de nucleación en el sistema a partir de los cuales este comienza a solidificar. Dicho parámetro se estudio modificando la constante de nucleación A del microconstituyente eutéctico. Se eligieron arbitrariamente cuatro valores de A con objeto de observar claramente la influencia de este parámetro sobre el comportamiento del sistema.

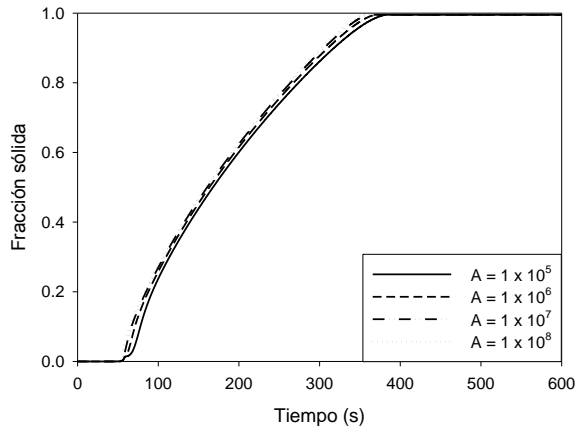
En la Figura 15 (a) se muestra que A tiene influencia sobre el subenfriamiento eutéctico en el historial térmico del sistema, ya que cuanto mayor es el valor de este parámetro menor es el subenfriamiento alcanzado. En la misma figura se aprecia que la influencia de A sobre el abatimiento del subenfriamiento cada vez es menor cuanto mayor es el valor de dicho parámetro, lo que significa que la nucleación deja de ser la etapa controlante en el proceso de solidificación.

Por otra parte, en la Figura 15 (b) se muestra que el inicio de la solidificación tiene lugar antes cuando se emplean valores grandes de A . Sin embargo, esta tendencia apenas es perceptible a un cuando los valores de A elegidos en este estudio varían entre sí de manera significativa (en uno, dos y tres órdenes de magnitud con respecto al valor más pequeño empleado).

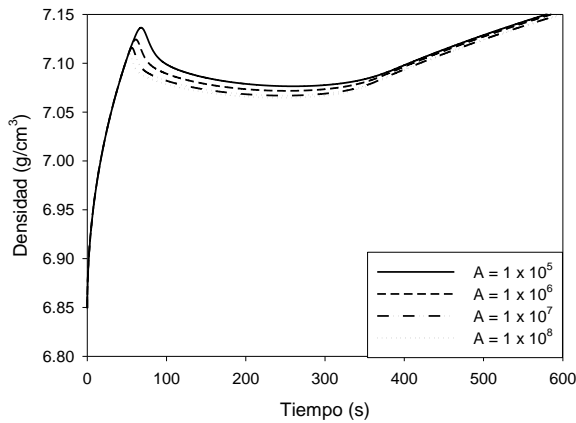
De acuerdo con la Figura 15 (d), el sistema sufre una mayor contracción durante el enfriamiento del metal líquido cuando se emplean valores pequeños de A , esto como resultado del mayor subenfriamiento experimentado por el sistema bajo estas condiciones. Además, durante la solidificación se observa que el sistema alcanza una mayor expansión con valores pequeños de A . Una vez concluido el proceso de solidificación, el cambio de volumen en el sistema tiende a ser el mismo en el sistema sin importar el valor de A empleado.



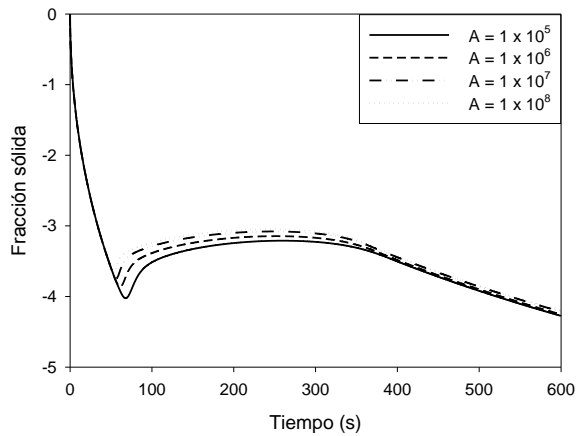
(a)



(b)



(c)



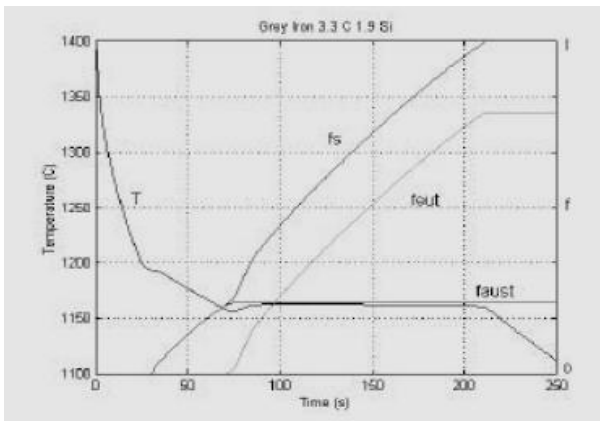
(d)

Figura 15. Evolución del sistema bajo estudio para tres diferentes valores en la constante $A = [1/m^3K^2]$, y manteniendo el resto de parámetros del proceso constantes: (a) curvas de enfriamiento, (b) fracción sólida, (c) densidad y (d) cambio de volumen en porcentaje.

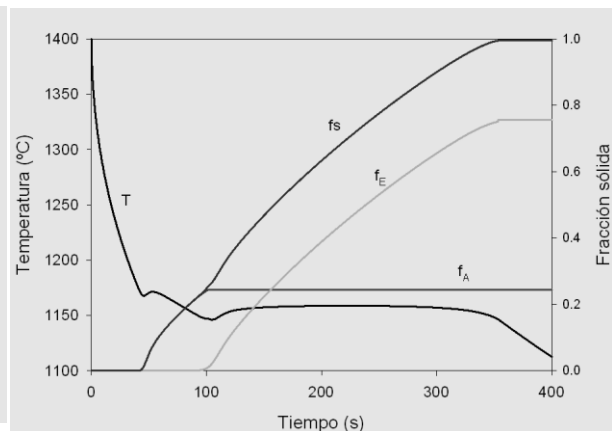
4.5. Validación del modelo

Con el propósito de comparar las predicciones del modelo elaborado en este trabajo con los resultados reportados en la literatura especializada, en la Figura 16 se muestran los resultados reportados por Svensson y Dioszegi [30] para el caso de un hierro gris con un contenido de carbono del 3.3% y con un 1.9% de silicio así como las predicciones del modelo

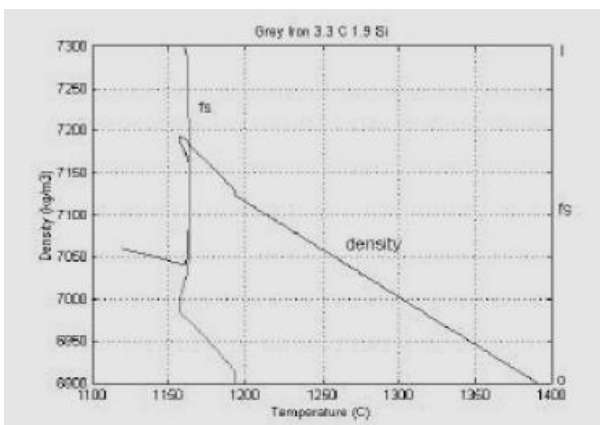
aquí elaborado referentes al mismo caso de estudio. En las figuras 16 (a) y 16 (b) se puede apreciar que el modelo elaborado en este trabajo arroja resultados similares a los reportados por Svensson y Dioszegi en lo referente al historial térmico y a la cinética de solidificación, observándose una mayor similitud en la cinética de solidificación, pues las fracciones obtenidas de austenita y eutéctico en el estudio de Svensson y Dioszegi y en el presente trabajo son prácticamente las mismas. El que haya pequeñas discrepancias en historial térmico reportado por Svensson y Dioszegi y el obtenido con el modelo aquí elaborado puede atribuirse a las propiedades termofísicas empleadas.



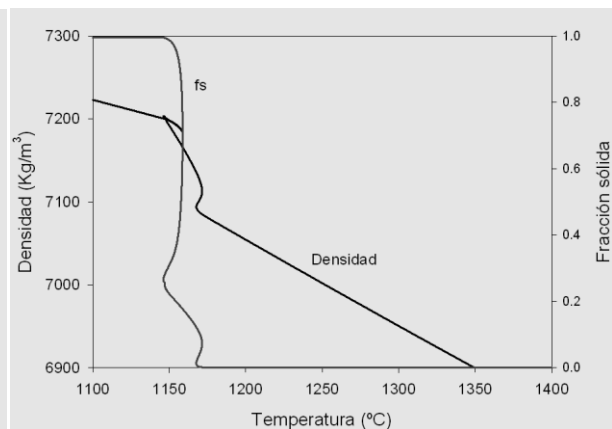
(a)



(b)



(c)



(d)

Figura 16. Comparación de los resultados reportados por Svensson y Dioszegi con los obtenidos con el modelo elaborado en este trabajo, tomando como caso de estudio un hierro gris con un contenido de C igual al 3.3% y con un contenido de Si de 1.9%.

Sin embargo, debido a que en el trabajo que está siendo comparado no se reportan las propiedades termofísicas empleadas no es posible comprobar la hipótesis antes enunciada.

Al observar las Figuras 16 (c) y 16 (d) se nota una gran diferencia entre el comportamiento predicho por el modelo aquí elaborado y el predicho por Svensson y Dioszegi, referente al cambio de densidad en el sistema, y en consecuencia al cambio de volumen. Dicha discrepancia tiene lugar durante la precipitación del microconstituyente eutéctico, ya que mientras el modelo presentado en este trabajo predice una pequeña disminución en la densidad del sistema, el modelo desarrollado por Svensson y Dioszegi sugiere que existe una gran disminución en la densidad del sistema como producto de la precipitación del microconstituyente eutéctico. Esta diferencia puede atribuirse a la forma en que fue calculada la densidad de la aleación durante esta etapa del proceso en el trabajo desarrollado por Svensson y Dioszegi y en el desarrollado aquí, pues si se observan nuevamente las Figuras 16 (c) y 16 (d), se puede notar que la densidad en el sistema durante el enfriamiento del líquido y durante la precipitación de austenita es muy similar en ambos trabajos. De nueva cuenta no hay forma de comparar más precisamente el algoritmo aquí elaborado con el desarrollado por Svensson y Dioszegi, ya que estos autores no reportan las propiedades y parámetros que emplearon para llevar a cabo las simulaciones.

Además de la comparación hecha anteriormente, se pretendía realizar una comparación del modelo aquí presentado con resultados experimentales reportados en la literatura. Sin embargo, no se encontraron resultados experimentales referentes a los cambios de volumen del hierro gris durante su solidificación y enfriamiento en la literatura consultada, por lo que esta forma de validación no pudo llevarse a cabo.

CONCLUSIONES

Se desarrollo un modelo capaz de simular los cambios de volumen en hierros grises de composición hipoeutéctica y eutéctica durante su enfriamiento y solidificación. Dicho modelo fue implementado en un programa de computo escrito en el lenguaje de programación Python y con el se simuló el comportamiento del sistema considerado en este trabajo, variando las siguientes variables de proceso: temperatura de colada, módulo de enfriamiento, composición química e inoculación. Los resultados obtenidos mostraron lo siguiente:

- Un aumento en la temperatura de colada provoca un incremento en la contracción del metal líquido. Sin embargo, no se observo ninguna influencia de este parámetro sobre el cambio de volumen relativo durante la solidificación del metal.
- Módulos de enfriamiento grandes provocan que el sistema tarde más en enfriarse y además provocan una disminución en el subenfriamiento eutéctico, por lo tanto la contracción líquida es menor. Además, en los hierros eutécticos la expansión producida durante la reacción eutéctica es menor cuanto mayor es el valor del módulo de enfriamiento.
- Un aumento de la cantidad de C o Si en los hierros hipoeutecticos provoca que la contracción del metal durante la reacción eutéctica sea menor, y este comportamiento es más marcado para el caso de la variación de C.
- En los hierros eutécticos, una disminución en el valor de la relación C/Si produce una mayor expansión del sistema durante la reacción eutéctica.
- Una fuerte inoculación (expresada a través de valores elevados de la constante de nucleación) tiende a disminuir el subenfriamiento eutéctico y como consecuencia, se produce una disminución en la contracción del metal líquido. Durante la solidificación el cambio de volumen en el

sistema fue menor en el caso de una inoculación elevada, sin embargo, el cambio de volumen tiende a ser el mismo, en términos absolutos, al final de la solidificación y durante el enfriamiento del metal líquido.

BIBLIOGRAFÍA

- [1] Z.B. Dwyer, R.D. Griffin and C.E. Bates, "Defects in Ductile Iron Castings", *AFS Transactions*, vol. 104, pp 89-95 (1996).
- [2] R.W. Heine, "Major Aspects of Processing Cast Irons", *AFS Transactions*, vol. 102, pp 985-1002 (1994).
- [3] L. Elmquist and A. Diószegi, "Shrinkage Porosity and its Relation to Solidification Structure of Grey Cast Iron Parts", *International Journal of Cast Metals Research*, vol. 23, pp 44-50 (2010).
- [4] James F. Shackelford, *Introducción a la Ciencia de Materiales para Ingeniería*, Pearson Educación, Madrid (2005).
- [5] J. Gerin Sylvia, *Cast Metals Technology*, Addison-Wesley, USA (1972).
- [6] D.K. Singh, *Fundamentals of Manufacturing Engineering*, CRC Press, India (2008).
- [7] Eudoxio Alberto Ramos Gómez, "Estudio de la Solidificación y Alimentación de una Pieza Colada de Hierro Nodular", Tesis de Licenciatura, Facultad de Química, UNAM (2008).
- [8] Hasse Fredriksson and Ulla Akerlind, *Materials Processing During Casting*, J. Wiley & Sons, New Jersey (2006).
- [9] Eli David, "Shrinkage in Nodular Iron", *Globe Metallurgical* (www.ductile.org/magazine/2001_3, 10/02/2010).
- [10] H. Fredriksson, J. Stjerndahl, J. Tinoco, "On the Solidification of Nodular Cast Iron and its Relation to the Expansion and Contraction", *Materials Science and Engineering*, pp 367-372 (2005).
- [11] Serope Kalpakjian, Steven R. Schmid, *Manufacturing Engineering and Technology*, Prentice Hall, USA (2001).
- [12] Harold D. Brody, "Simulation of Solidification Processes", *Process Modeling: Fundamentals and Applications to Metals*, TMS Publications, pp 27-35 (1980).

- [13] Tony Midea, "Casting Process Simulation in Iron Foundries", Foseco Inc. (www.ductile.org/magazine/2000_3, 10/02/2010)
- [14] G. Upadhy, A.J. Paul, "Solidification Modeling: A Phenomenological Review", *AFS Transactions*, vol. 102, pp 69-80 (1994).
- [15] Heriberto Torres García, "Aplicación del Análisis Térmico en el Control Microestructural de Materiales Compuestos Al-Si/SiCp", Tesis de Maestría, Facultad de Química, UNAM (1999).
- [16] J. M. Borrajo, R.A. Ramírez, R.E. Boeri, "Aplicabilidad de Modelos Matemáticos para Simular la Nucleación de Partículas de Grafito en Fundición Esferoidal de Pequeños Espesores", Sam-Simposio Materia (2002).
- [17] Maijer, S.L. Cockcroft and W. Patt, "Mathematical Modeling of Microstructural Development in Hypoeutectic Cast Iron", *Metallurgical and Materials Transactions A*, vol. 30A, pp. 2147-2158 (1999).
- [18] C.S. Kanetkar, D.M. Stefanescu, "Macro-Micro Modeling of Solidification of Hipoeutectic and Eutectic Al-Si Alloys", *AFS Transactions*, vol. 96, pp 591-598 (1988).
- [19] R.W. Heine, "A Model for Specific Volume and Expansion and Contraction Behavior of Solidifying and Cooling Ductile and Gray Iron", *AFS Transactions*, vol. 96, pp 413-422 (1988).
- [20] F.J. Bradley, "On Finite Element Solidification Simulation for Shrinkage Prediction in Commercial Ductile Iron Castings", *Modeling of Casting, Welding and Advanced Solidification Processes V*, Ed. M. Rappaz et al., TMS Publications, pp 77-82 (1991).
- [21] Q. Chen, E.W. Langer, P.N. Hansen, "Influence of the Process Parameters on the Volume Change During the Eutectic Reaction of S.G. Cast Iron: A Computer Simulation", *Journal of Materials Science*, vol. 32, pp 1239-1248 (1997).

- [22] Q. Chen, E.W. Langer, P.N. Hansen, "Volume Change During the Solidification of SG Iron: Comparison Between Experimental Results and Simulation", *Journal of Materials Science*, vol. 32, pp 1825-1833 (1997).
- [23] Q. Chen, "Influence of C, Si on Volume Change of SG Iron During Solidification-Computer Modeling for Hypereutectic and Hypoeutectic Compositions", *Journal of Materials Science Letters*, vol. 16, pp 1288-1290 (1997).
- [24] R.W. Heine, "The Fe-C-Si Solidification Diagram for Cast Irons", *AFS Transactions*, vol. 94, pp 391-402 (1986).
- [25] Fras, W. Kapturkiewicz and H.F. Lopez, "Macro and Micro Modeling of the Solidification Kinetics of Castings", *AFS Transactions*, vol. 100, pp 583-591 (1992).
- [26] Carlos Gonzalez Rivera, "Simulación de la Transferencia de Calor y de la Cinética de Solidificación de Aleaciones Hipoutéticas y Eutéctica Al-Si Coladas en Moldes de Arena", Tesis Doctoral, Facultad de Química, UNAM (1998).
- [27] J. Lacaze, M. Castro, G. Lesoult, "Solidification of Spheroidal Graphite Cast Irons: II Numerical Simulation", *Acta Metallurgica*, vol. 46, pp 997-1010 (1998).
- [28] S. Chang, D. Stefanescu, "Prediction of Microstructural Evolution in SG Cast Iron from Solidification to Room Temperature", *AFS Transactions*, vol. 99, pp 531-541 (1991).
- [29] Metals Handbook, Volume 15, "Casting", ASM, 9th edition (1988).
- [30] Ingvar L Svensson, Attila Dioszegi, "On Modelling of Volume related Defect Formation in Cast Irons", *Modeling of Casting, Welding and Advanced Solidification Processes IX*, Ed. Peter R. Sahm et al., TMS Publications.
- [31] Steven C. Chapra, Raymond P. Canale, Métodos Numéricos para Ingenieros, McGraw-Hill, México (2007).

APÉNDICE A. DENSIDAD DE LA AUSTENITA

Debido a la escases de datos experimentales reportados en la literatura, concernientes a la densidad de la austenita, en este trabajo se optó por determinar dicha propiedad a partir de un modelo que se basa en mediciones del parámetro de red. El modelo, reportado en la referencia [19], consiste en determinar la masa de una celda unitaria de austenita y dividirla entre su volumen, tomando en cuenta que átomos de silicio se encuentran formando una solución sólida sustitucional con esta fase y la presencia de átomos de carbono en los intersticios (en solución solida intersticial).

La austenita posee una estructura cristalina FCC cuya celda unitaria consta de cuatro átomos. Dado que esta fase se encuentra aleada en forma sustitucional con el silicio, es necesario determinar primeramente cuantos de esos cuatro átomos son de hierro y cuantos de silicio. Para ello se parte de la composición química de la austenita. Ya que esta se encuentra expresada en porcentaje en peso, primero hay que realizar una conversión a fracción molar.

Partiendo de una composición de silicio %Si y de carbono %C conocidas:

$$\%Fe = 100 - \%Si - \%C$$

$$nFe = \frac{\%Fe}{55.85}$$

$$nSi = \frac{\%Si}{28.09}$$

$$nC = \frac{\%C}{12.01}$$

$$X_{Fe} = \frac{nFe}{nFe + nSi + nC}$$

$$X_{Si} = \frac{nSi}{nFe + nSi + nC}$$

$$X_C = \frac{nC}{nFe + nSi + nC}$$

Con la conversión hecha, el número de átomos de silicio por celda unitaria se obtiene de la expresión que se enuncia a continuación, que representa la proporción de átomos de silicio por átomos de hierro en la celda:

$$\frac{X_{Si}}{X_{Fe}} = \frac{Si}{4 - Si}$$

Donde Si es el número de átomos de silicio por celda.

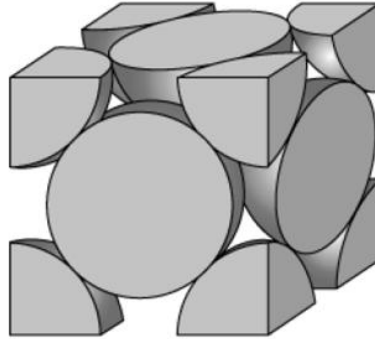


Figura 17. Celda unitaria de la estructura cristalina cúbica centrada en las caras (FCC). El número de átomos por celda unitaria es de cuatro: ocho octavos de átomo dispuestos en los vértices y seis medios átomos ubicados en las caras.

Por otra parte, también es necesario conocer el número de átomos de carbono, C , contenidos de forma intersticial en la celda unitaria. Este valor se obtiene de la expresión siguiente, que se refiere a la obtención de la fracción mol de carbono a partir de los átomos contenidos en la celda unitaria:

$$X_c = \frac{C}{4 + C}$$

Con los valores Si y C obtenidos se determina la masa de la celda a partir de la expresión siguiente:

$$m_{FCC} = \frac{55.85(4 - Si) + 28.09Si + 12.01C}{0.6023 \times 10^{24}}$$

Donde m_{FCC} está dado en gramos. Mientras que el volumen de la celda, se obtiene simplemente elevando al cubo el valor del parámetro de red obtenido a partir de la expresión siguiente, obtenida de la referencia [¡Error! No se encuentra el origen de la referencia.]:

$$a = 0.35698 + (T - 20) \times 8.6 \times 10^{-6}$$

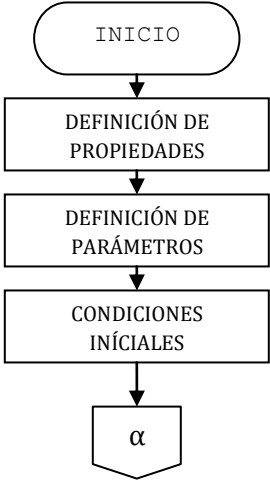
$$V_{FCC} = a^3 \times \left(\frac{1 \text{ cm}}{10^7 \text{ nm}} \right)^3$$

Donde V_{FCC} es el volumen de la celda expresado dado en cm^3 . Por lo tanto, la densidad de la austenita finalmente se obtiene al dividir m_{FCC} entre V_{FCC} .

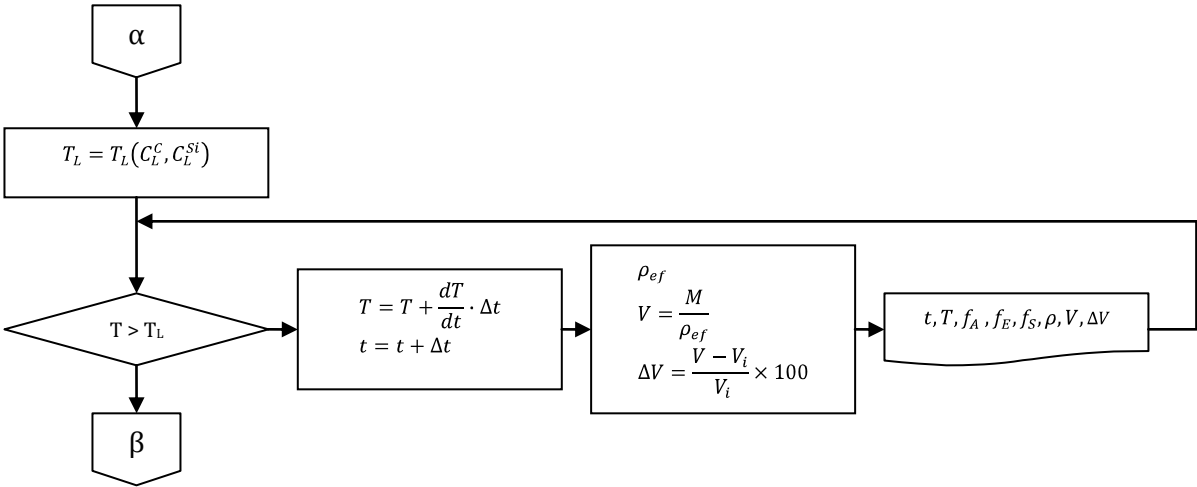
$$\rho_{FCC} = \frac{m_{FCC}}{V_{FCC}}$$

APÉNDICE B. DIAGRAMA DE FLUJO

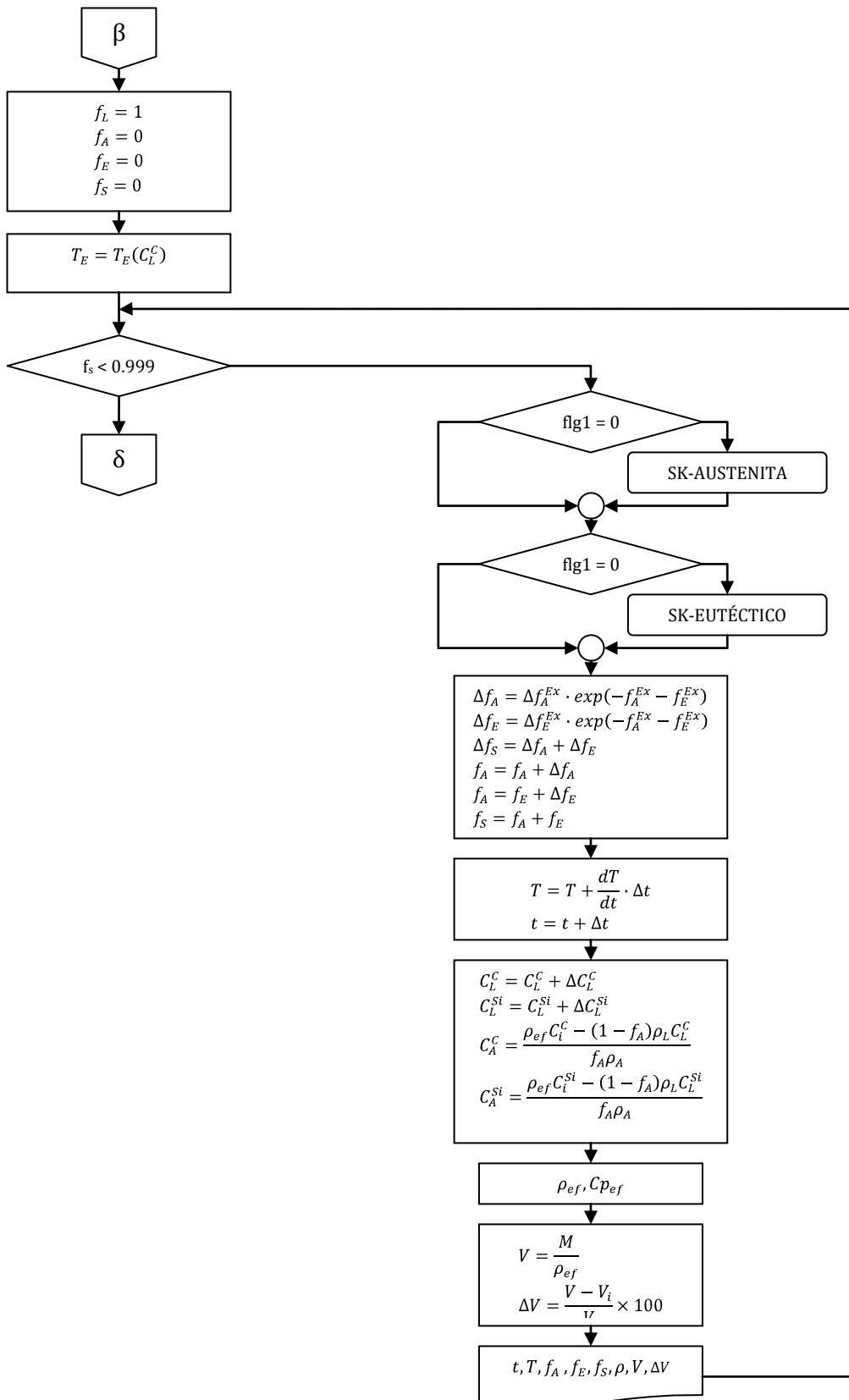
a) Definición de propiedades y parámetros e inicialización.

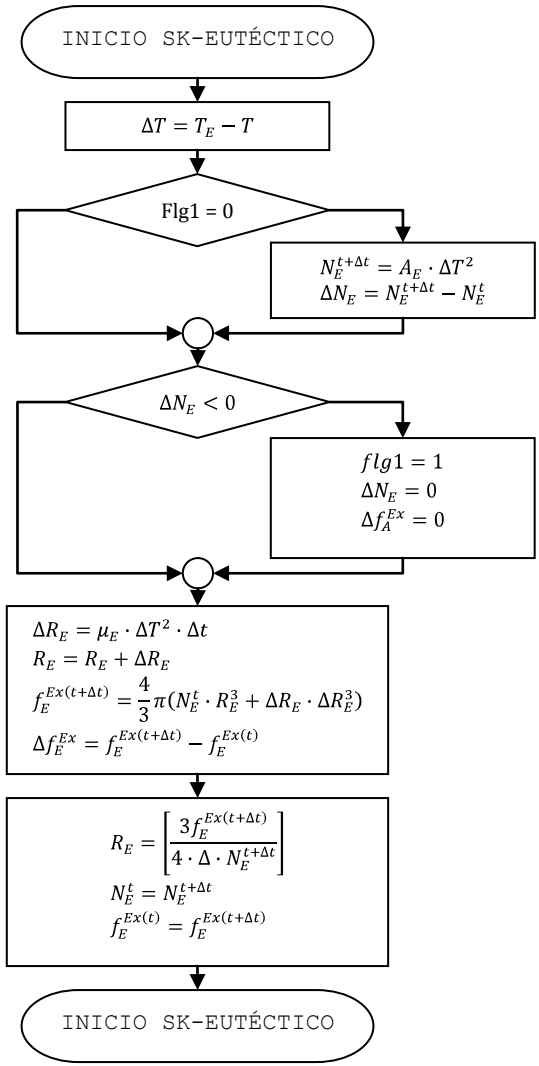
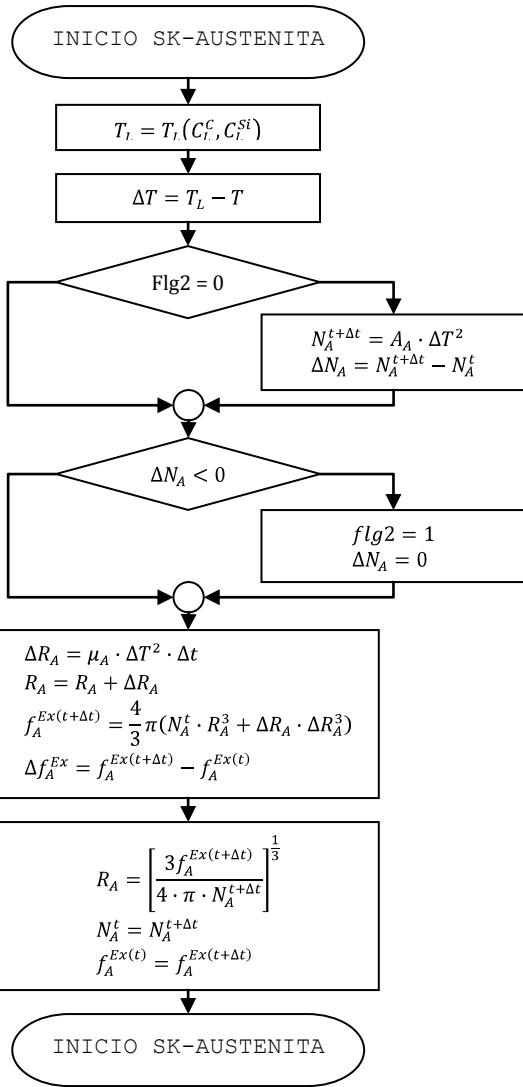


b) Enfriamiento del metal líquido.

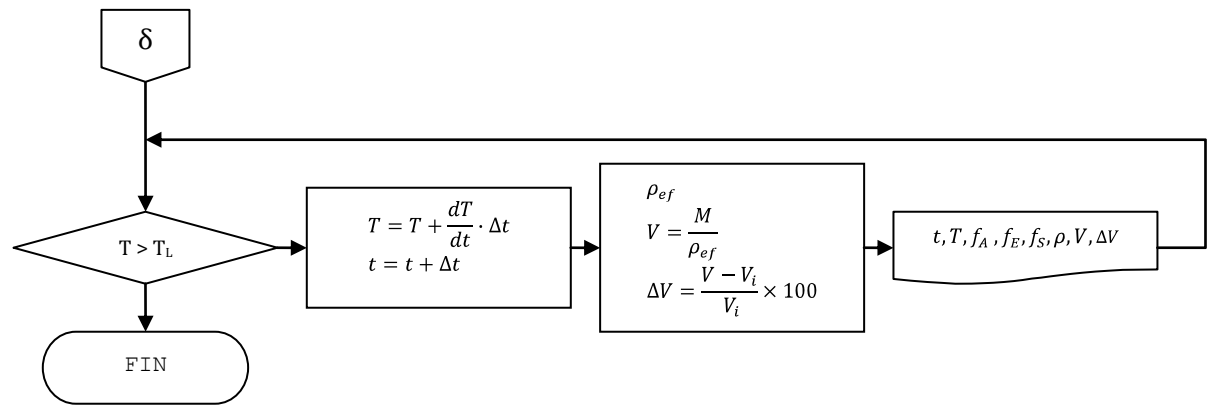


c) Solidificación y enfriamiento.





d) Enfriamiento del metal sólido



APÉNDICE C. PROGRAMA DE COMPUTO (PYTHON)

```
from math import pi, sqrt, exp

#----- Propiedades y parametros -----#

def dl(x):      # x-->T
    y = 1000/(2.12245e-5*x + 1.16286e-1)
    return z

def da(x, y, z): # x-->T, y-->%C, z-->%Si
    Fe = 100 - y - z
    nFe = Fe/55.85
    nC = y/12.01
    nSi = z/28.09
    nt = nFe + nC + nSi
    XFe = 100*nFe/nt
    XC = 100*nC/nt
    XSi = 100*nSi/nt
    X = 4*XSi/(XFe + XSi)
    c = 4*XC/(100 - XC)
    a = 3.5698 + (x - 20)*8.6e-5
    w = 1000*(55.85*(4 - X) + 28.09*X + 12.01*c)/(0.6023*(a**3))
    return w

def dg(x):      # x-->T
    y = 1000/(1.11013e-5*x + 4.74178e-1)
    return y

def ho(x):      # x-->t
    Cpm = 1193
    Km = 0.9
    dm = 1550

    if x=0:
        h = sqrt(Cpm*Km*dm)/sqrt(pi*0.1)
    else:
        h = sqrt(Cpm*Km*dm)/sqrt(pi*x)
    return h

Cpl = 750
Cps = 830
Ha = 1904e6
He = 2028e6
Aa = 5e8
Ae = 12.86e6
ua = 3e-9
ue = 1.6e-8
kc = 0.48
ksi = 1.17

archivo = 'Archivo.txt'

dt = 0.1
D = 0.04
L = 0.10
Tc = 1400
```

```

To = 25
Co = 3
Sio = 2

Cmax = 2.1 - 0.217*Sio
Ce = 4.26 - 0.3167*Sio
fae = (100 - Ce)/(100 - Cmax)
fge = 1 - fae

f = open(archivo, 'w')

#----- Inicializacion de variables -----#

C = Co
Si = Sio
t = 0.0
T = Tc
Tl = 1569 - 97.3*(C + 0.25*Si)
Te = 1155 + 6.5*Si
R = D/2.0
A = pi*D*L
Vi = pi*(R**2)*L
V = Vi
VC = 0.0
d = dl(T)
M = Vi*d
Nao = 0.0
Neo = 0.0
Ra = 0.0
Re = 0.0
feao = 0.0
feeo = 0.0
dfea = 0.0
dfee = 0.0
fa = 0.0
fe = 0.0
fs = 0.0
fl = 1.0
flg1 = 0
flg2 = 0

#----- Enfriamiento de la fase liquida -----#

while T>Tl:

    dTdt = -ho(t)*A*(T - To)/(d*Cpl*V)
    T = T + dTdt*dt
    t = t + dt
    d = dl(T)
    V = M/d
    VC = 100*(V - Vi)/Vi

    f.write('%f %f %f %f %f %f %f %f\n' % (t, T, fa, fe, fs, d*1e-3, V*1e6, VC))

#----- Solidificacion y enfriamiento -----#

Cp = fl*Cpl + fs*Cps

while fs<0.995:

```

```

if flg1=0:

    Tl = 1569 - 97.3*(C + 0.25*Si)
    dT = Tl - T

    if flg2=0:
        Nan = Aa*(dT**2)
        dNa = Nan - Nao
    if dNa<0.0:
        flg2 = 1
        dNa = 0.0

    dRa = ua*(dT**2)*dt
    Ra = Ra + dRa
    fean = (4.0/3.0)*pi*(Nao*(Ra**3) + dNa*(dRa**3))
    dfea = fean - feao
    Ra = (3*fean/(4*pi*Nan))**(1.0/3.0)

    Nao = Nan
    feao = fean

if T<Te:

    dT = Te - T

    if flg1=0:
        Nen = Ae*(dT**2)
        dNe = Nen - Neo
    if dNe<0.0:
        flg1 = 1
        dNe = 0.0

    dRe = ue*(dT**2)*dt
    Re = Re + dRe
    feen = (4.0/3.0)*pi*(Neo*(Re**3) + dNe*(dRe**3))
    dfee = feen - feeo
    Re = (3*feen/(4*pi*Nen))**(1.0/3.0)

    Neo = Nen
    feeo = feen

dfa = dfea*exp(-feao - feeo)
dfe = dfee*exp(-feao - feeo)
dfs = dfa + dfe
fa = fa + dfa
fe = fe + dfe
fs = fa + fe
fl = 1 - fs

dTdt = -ho(t)*A*(T - To)/(d*Cp*V) + (Ha*dfa + He*dfe)/(d*Cp*dt)
T = T + dTdt*dt
t = t + dt

dC = C*(1 - kc)*dfa/(1 - fs)
dSi = Si*(1 - ksi)*dfa/(1 - fs)
C = C + dC
Si = Si + dSi

```

```

Cs = (Co - C*(1 - fa))/fa
Sis = (Sio - Si*(1 - fa))/fa

Cp = fl*Cpl + fs*Cps
de = da(T, Cs, Siae)*dg(T)/(fae*dg(T) + fge*da(T, Cs, Siae))
d = fl*dl(T) + fa*da(T, Cs, Sis) + fe*de
V = M/d
VC = 100*(V - Vi)/Vi

f.write('%f %f %f %f %f %f %f %f\n' % (t, T, fa, fe, fs, d*1e-3, V*1e6, VC))

while T>1000:

dTdt = -ho(t)*A*(T - To)/(d*Cps*V)
T = T + dTdt*dt
t = t + dt

de = da(T, Cs, Siae)*dg(T)/(fae*dg(T) + fge*da(T, Cs, Siae))
d = fa*da(T, Cs, Sis) + fe*de
V = M/d
VC = 100*(V - Vi)/Vi

f.write('%f %f %f %f %f %f %f %f\n' % (t, T, fa, fe, fs, d*1e-3, V*1e6, VC))

f.close()

```