



UNIVERSIDAD NACIONAL AUTONOMA
DE MEXICO

7

ZED

FACULTAD DE QUIMICA



EXAMENES PROFESIONALES
FAC. DE QUIMICA

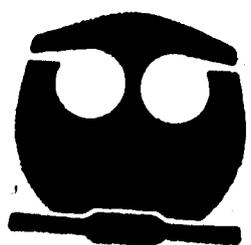
INFLUENCIA DE LA VELOCIDAD DE ENFRIAMIENTO
SOBRE EL TAMAÑO DE GRANO EN UNA ALEACION
EUTECTICA AL-SI.

T E S I S

QUE PARA OBTENER EL TITULO DE
INGENIERO QUIMICO METALURGICO

P R E S E N T A :

H E C T O R C R U Z M E J I A



México, D.F.

1995

FALLA DE ORIGEN

TESIS CON
FALLA DE ORIGEN



Universidad Nacional
Autónoma de México



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.

TESIS CON FALLA DE ORIGEN

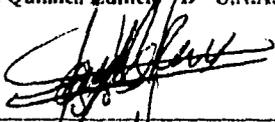
JURADO ASIGNADO:

PRESIDENTE: PROF. EUSEBIO CÁNDIDO ATLATENCO TLAPANCO
VOCAL: PROF. JOSÉ ALEJANDRO GARCÍA HINOJOSA
SECRETARIO: PROF. CARLOS GONZÁLEZ RIVERA
1er SUPLENTE: PROF. IGNACIO BELTRÁN PIÑA.
2do SUPLENTE: PROF. SERGIO GARCÍA GALÁN

Sitio donde se desarrollo el tema:

Laboratorio de Fundición
Departamento de Ingeniería Química Metalúrgica
Facultad de Química Edificio "D" U.N.A.M.

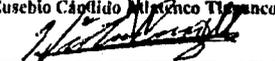
Asesor del tema:


M en C. Carlos González Rivera.

Supervisor Técnico:


I.Q.M Eusebio Cándido Atlatenco Tlapanco.

Sustentante:


Héctor Cruz Mejía

RECEBIDO
SECRETARÍA
UNIVERSIDAD NACIONAL AUTÓNOMA DE MEXICO
SECRETARÍA DE INVESTIGACIONES CIENTÍFICAS

Dedicatorias

Con cariño y respeto a mis padres.

Sr. Prisciliano Cruz Guerrero.

Sra. Amalia Mejía Castorena.

por creer siempre en mi

A mis hermanos Matilde, Oscar y DoraNelly por soportarme y apoyarme todo este tiempo.

A la memoria de los Sres Leticia e Hiram Lagunes Hernandez.

Agradecimientos.

Al M. en C. Carlos Gonzalez Rivera por brindarme su confianza, apoyo y amistad.

Al equipo de Fundación sin los cuales no sería posible este trabajo.

A mis amigos y compañeros que durante toda mi formación estuvieron siempre conmigo.

CONTENIDO

RESUMEN	1
INTRODUCCIÓN	3
OBJETIVOS	7
CAPITULO I. POSICIÓN DEL PROBLEMA	
I.1 IMPORTANCIA DE LAS VARIABLES QUE AFECTAN AL TAMAÑO DE GRANO	8
I.2 ANALISIS DE UNA CURVA TIPICA DE ENFRIAMIENTO ASOCIADA AL ENFRIAMIENTO Y SOLIDIFICACION DE LA ALEACION EUTECTICA AL - SI	10
I.3 OBTENCION DE CURVAS DE ENFRIAMIENTO	13
CAPITULO II. PLANTEAMIENTO DE LOS MICROMACROMODELOS	
II.1 GENERALIDADES	15
II.2 DESCRIPCION DEL MODELO	17
II.2.1 PLANTEAMIENTO DEL MODELO A PARTIR DE UN BALANCE GLOBAL DE ENERGIA	18
II.2.2 PLANTEAMIENTO DEL MACROMODELO CONSIDERANDO BALANCES INFINITESIMALES DE ENERGIA	21
II.2.3 RESOLUCIÓN	22
II.3 METODO DE RECUPERACIÓN DE TEMPERATURA	27
II.4 MODELO CINETICO	28
CAPITULO III. APLICACION DE LOS MICROMACROMODELOS A LA SIMULACION DE LAS CONDICIONES DE PROCESO SOBRE EL TAMAÑO DE GRANO Y LAS CURVAS DE ENFRIAMIENTO ASOCIADAS.	
III.1 GENERALIDADES Y DESCRIPCION DE LOS PROGRAMAS ELABORADOS	32
III.2 RESULTADOS OBTENIDOS DEL MODELO DE BALANCE GLOBAL	34

III.2.1 EFECTO DE LA TEMPERATURA DE COLADA	36
III.2.2 EFECTO DEL ESPESOR DE LA PIEZA	37
III.2.3 EFECTO DE LA DIFUSIVIDAD DEL MATERIAL DE MOLDEO	38
III.2.4 EFECTO DEL NUMERO DE SITIOS DE NUCLEACION	39
III.3. RESULTADOS DEL MODELO QUE CONSIDERA GRADIENTES INTERNOS DE TEMPERATURA.	42
CAPITULO IV .DESAROLLO Y RESULTADOS EXPERIMENTALES	
IV.1 DESCRIPCION DEL ARREGLO EXPERIMENTAL	43
IV.2 RESULTADOS EXPERIMENTALES	46
IV.3 COMPARACION EXPERIMENTO - MODELOS	52
IV.4 DISCUSION DE RESULTADOS	55
CONCLUSIONES	56
BIBLIOGRAFIA	58
APENDICE A	60
APENDICE B	63
APENDICE C	71
APENDICE D	72

RESUMEN.

En este trabajo se explora de manera experimental la influencia de la velocidad de enfriamiento sobre el tamaño de grano y las curvas de enfriamiento asociadas a la solidificación de una aleación eutéctica Al - Si colada en un molde de arena.

Para tal efecto se modifican las variables de proceso que afectan en mayor medida a la velocidad de enfriamiento durante la elaboración ,en planta , de piezas fundidas. Estas variables son : la temperatura de colada y el espesor de la pieza, y la experimentación se realiza con el fin de establecer los efectos que sobre el tamaño de grano provocan cambios en las variables mencionadas.

Las tendencias encontradas experimentalmente son analizadas a la luz de los resultados proporcionados por dos micro macro modelos, que acoplan la cinética de solidificación equiaxial eutéctica con la transferencia de calor asociada al enfriamiento y solidificación del eutéctico Al-Si colado en moldes de arena.

Estos modelos matemáticos son empleados para simular el enfriamiento y solidificación de la aleación eutéctica Al - Si bajo las condiciones experimentales consideradas y la contrastación entre los resultados arrojados por los modelos y los datos experimentales se utilizan para proponer razonamientos que pretenden explicar dichas tendencias y con esto , se establece la ruta experimental y teórica a seguir en trabajos futuros

La diferencia entre los dos modelos propuestos en este trabajo radica en la manera en que se plantea el principio de conservación de energía ,el cual constituye la columna vertebral del planteamiento matemático del problema, ya que se asume que el principal mecanismo de transferencia de calor es la conducción.

En el caso del primer modelo se parte de un balance global de energía aplicado al metal y se considera adicionalmente , un modelo simplificado de transferencia de calor basado en una solución analítica de la ecuación de Fourier en una dirección para simular al

flux de calor que abandona al metal a través de la interfase molde-metal .Se asume que el proceso de enfriamiento consta de tres etapas : enfriamiento del líquido, solidificación y enfriamiento del sólido. Durante la etapa de solidificación se realiza el acoplamiento del modelo cinético empleando el método de recuperación de temperatura Las ecuaciones diferenciales que resultan de este planteamiento son resueltas mediante un método numérico.

En el segundo modelo la ecuación general de conducción en el medio compuesto molde - metal,es resuelta empleando el método de diferencias finitas en el esquema implícito considerando coordenadas cilíndricas y una dirección.

Durante la solidificación se emplea el método de recuperación de temperatura para realizar el acoplamiento con el modelo cinético .

INTRODUCCIÓN .

ANTECEDENTES.

La industria nacional al igual que el resto del país enfrenta el reto de la modernización , requiriendo para ello que los productos y servicios que proporcionan las empresas nacionales cumplan con las normas de calidad a nivel mundial.

En el caso particular de la industria de la fundición, la obtención de piezas que cumplan con los requerimientos internacionales implica que cada una de las etapas que constituyen al proceso sean cuidadosamente comprendidas y controladas.

Una de las etapas mas importantes es la que corresponde a la solidificación de la aleación , ya que es en esta etapa donde se definen características microestructurales que determinan el desempeño del producto , y en esta etapa es posible influir en la microestructura obtenida en la pieza.

Para muchas aleaciones de interés industrial , una de las características microestructurales de mayor importancia es el tamaño de grano, como por ejemplo el caso de las aleaciones Al-Cu. destinadas básicamente a la producción de lingotes para conformado mecánico.

En el caso de las aleaciones comerciales Al - Si , que constituyen del 80% al 90% de la producción de piezas fundidas en aleaciones base Al ,y debido a la presencia de una cantidad considerable de eutéctico, además del tamaño de grano , influyen en sus propiedades las características microestructurales del eutéctico como lo son la morfología y la distancia interlamínar promedio del eutéctico así como el espaciamiento interdendrítico secundario (DAS) que presenta la fase proeutéctica .

Dentro de los aspectos microestructurales ya señalados, y en el caso del tamaño de grano se ha encontrado que una disminución de tamaño de grano favorece la obtención de mejores propiedades mecánicas como es el esfuerzo de fluencia, la resistencia a la fatiga, la maquinabilidad, se promueve un reparto más homogéneo de las inclusiones y también se mejora la apariencia superficial de aleaciones sujetas a anodizado ¹⁰, y todo lo anterior, sin duda repercute en beneficios económicos para cualquier empresa metalúrgica.

Durante los últimos años el empleo del análisis térmico como método para la evaluación del tratamiento del metal líquido, en lo que respecta al control de la refinación de grano y del nivel de modificación del eutéctico ³, se ha transformado en la principal herramienta de control de dichos tratamientos debido a la rapidez y sencillez de su aplicación

En esta prueba la curva de enfriamiento del metal es obtenida e interpretada, a partir de resultados experimentales previos que proporcionan criterios empíricos para establecer si los tratamientos cumplen o no con las características deseadas. El empleo de curvas de enfriamiento con tales fines es posible debido a que éstas son una manifestación macroscópica de los eventos que acontecen durante el enfriamiento y solidificación de la aleación.^{9, 23}

A este respecto durante los años recientes el modelado de procesos de solidificación ha cobrado un gran auge ya que proporciona elementos que permiten la comprensión de los fenómenos involucrados durante la solidificación, sin embargo el número de estudios a este respecto es todavía muy limitado.

Cabe señalar que los mayores esfuerzos realizados en esta línea de investigación se han centrado en el modelado macroscópico, particularmente en la obtención de soluciones analíticas y numéricas para las ecuaciones de conservación en presencia de cambio de fase, con el fin de obtener las isócronas de solidificación de aleaciones de rango corto de solidificación, a partir de concebir al problema desde un punto de vista exclusivamente térmico e ignorando a la cinética de solidificación, que es un proceso de nucleación y

crecimiento, y cuya evolución determina a las características microestructurales del producto solidificado.

A raíz de esta carencia surgió, en la segunda mitad de los ochentas, un nuevo enfoque a la simulación de la solidificación, denominado micro-macro modelado ¹⁹, el cual tiene por objetivo el establecer vínculos cuantitativos entre las condiciones de proceso y la microestructura presente en el producto solidificado a partir de modelos mecánicos que incluyen dentro de sus planteamientos a un modelo cinético para simular al cambio de fase

Dentro de este marco este trabajo considera tanto a la transferencia de calor como a la cinética de solidificación, ubicándose dentro de esa nueva corriente del modelado de la solidificación, y en él se han planteado dos alternativas para aplicar al principio de conservación de energía, un balance global de energía aplicado al metal y un balance infinitesimal de energía aplicado al medio compuesto molde metal.

Las dos aproximaciones permiten simular la respuesta térmica y microestructural presente durante la solidificación de la aleación bajo condiciones específicas de proceso: la primera en función del tiempo y la segunda en función del tiempo y de la posición dentro de la pieza.

El objetivo de este trabajo es establecer a partir de los resultados generados por un micro-macro modelo, las tendencias que sobre el tamaño de grano tienen distintas variables de proceso como lo son la temperatura de colada y el espesor de la pieza y verificar experimentalmente que tanto se cumplen las predicciones del modelo y cuales son sus limitaciones.

Para ello se ha establecido como primer punto explicar los aspectos más importantes de las curvas de enfriamiento así como son su interpretación, y obtención y la información que de ellas es posible obtener a fin de poder facilitar la comprensión del problema bajo estudio.

Posteriormente se explicara a cada uno de los micro - macro modelos considerando las hipótesis simplificativas inherentes a cada uno de ellos , explicándose también la metodología utilizada para su construcción y la implementación a seguir para su desarrollo.

Una vez que los modelos han sido ya generados se procederá a la obtención de resultados que estos proporcionan con el objeto de formular algunas hipótesis y realizar algunas consideraciones para el trabajo experimental posterior mismo que permitirá observar si las tendencias experimentales corresponden a las predichas por los modelos matemáticos.

OBJETIVOS

- 1.- Elaborar un modelo mecanístico que acople la transferencia de calor con la cinética de solidificación a fin de simular las curvas de enfriamiento y predecir el tamaño de grano obtenido al final de la solidificación, obtenidos durante el enfriamiento y solidificación de cilindros infinitos de aleación eutéctica Al-Si moldeadas en arena bajo condiciones específicas de proceso.
- 2.- Establecer, mediante el modelo elaborado, los efectos que tienen diferentes variables de proceso sobre el tamaño de grano y las curvas de enfriamiento asociadas a la aleación bajo estudio
- 3.- Determinar experimentalmente los efectos del diámetro de cilindro y de la temperatura de colada sobre el tamaño de grano presente en el eutéctico Al-Si y confrontar estos resultados con la información arrojada por los micromacromodelos elaborados, con el fin de establecer las limitaciones del planteamiento teórico propuesto.

CAPITULO I

POSICIÓN DEL PROBLEMA

I.1 IMPORTANCIA Y VARIABLES QUE AFECTAN AL TAMAÑO DE GRANO

Las propiedades de un material dependen de las características microestructurales que este presenta, como lo son, principalmente, el espaciamiento interdendrítico secundario, el tamaño de grano, la presencia de inclusiones, la porosidad y la morfología de los microconstituyentes.

El tamaño de grano obtenido de solidificación en lingotes y en piezas fundidas en aleaciones comerciales base aluminio constituye actualmente uno de los parámetros más comunes de aseguramiento de calidad impuesto por los usuarios de estos productos, sobre todo en el caso de las aleaciones base Al-Cu, que son básicamente monofásicas.

En estas aleaciones se ha encontrado que al disminuir el tamaño de grano se mejoran en cierta medida algunas propiedades de la aleación sólida, como la tensión de fluencia del material, la resistencia a la tracción (UTS), la resistencia a la fatiga, la tenacidad y la resistencia a la corrosión intergranular, lográndose una mayor homogeneidad en el reparto de inclusiones en los límites de grano y un mejor acabado superficial, esto último referido a piezas que son sometidas a anodizado.¹⁰

Cabe mencionar que las propiedades de las aleaciones que contienen una gran cantidad de eutéctico, como es el caso de las aleaciones Al-Si de interés comercial, son mucho menos dependientes del tamaño de grano, y se ven afectadas en mayor medida por las características del microconstituyente eutéctico y por el espaciamiento interdendrítico secundario (D.A.S.) de la fase proeutéctica, y sin embargo el tratamiento de refinación de grano en estas aleaciones es una práctica estandarizada dentro del tratamiento del metal.

líquido asociado, por los beneficios que proporciona sobre las propiedades finales del producto fundido.

El tamaño de grano, obtenido directamente de solidificación, depende básicamente del número de sitios de nucleación presentes durante la solidificación, y, a su vez, la activación de embriones, para que funjan como núcleos de los granos en crecimiento, depende de tres tipos de parámetros ^{4,11}: (1) Composición de la Aleación; (2) Velocidad de enfriamiento; (3) Condiciones hidrodinámicas en el metal líquido durante la solidificación.

Existen, en principio, cuatro maneras para disminuir el tamaño de grano de una aleación, las cuales presentan el objetivo común de incrementar el número de sitios de nucleación: (1)-la introducción de agentes refinadores de grano, (2) la introducción de elementos de aleación que presentan una fuerte tendencia a la segregación (3)- un incremento en la velocidad de enfriamiento durante la solidificación (4) la agitación de la aleación líquida durante la solidificación.

En la literatura existe poca información con respecto al análisis del efecto de la velocidad de enfriamiento sobre el tamaño de grano ¹², aparte de observaciones empíricas o análisis de carácter cualitativo que indican que un incremento en la velocidad de enfriamiento provoca una disminución del tamaño de grano, sin establecer si existen, y en que consisten, las limitaciones para este efecto en ausencia, por ejemplo, de agentes refinadores de grano y si este efecto se ve afectado por otros fenómenos presentes durante la solidificación de la aleación.

El establecer estos últimos aspectos constituye uno de los objetivos principales de la parte experimental de este trabajo, la cual será realizada partiendo de la premisa básica que consiste en asumir que una mayor velocidad de enfriamiento durante la solidificación provoca un incremento en el subenfriamiento máximo alcanzado por la aleación líquida, la activación de un número mayor de embriones y en consecuencia un menor tamaño de grano.

La hipótesis de trabajo, que surge de la teoría clásica de la nucleación ²⁴, será soportada, a su vez, de manera cuantitativa, por el planteamiento teórico y matemático

inherente a los micromacromodelos que serán desarrollados, los cuales serán empleados para simular a las curvas de enfriamiento asociadas al enfriamiento y solidificación de cilindros de eutéctico Al-Si y para predecir el tamaño de grano al final de la solidificación, bajo diferentes condiciones de Temperatura de colada , diámetro de cilindro, número de sitios de nucleación (refinación de grano) y difusividad térmica de la mezcla de arena de moldeo

Experimentalmente se explorará el efecto de las dos variables que controlan, bajo condiciones convencionales de producción de piezas coladas en planta a la velocidad de enfriamiento durante la solidificación : la temperatura de colada y el espesor de la pieza..

Se obtendrán, bajo diferentes condiciones experimentales , a las curvas de enfriamiento asociadas al enfriamiento y solidificación de cilindros de aleación eutéctica Al-Si ,colados en moldes de arena, y se realizará el análisis metalográfico correspondiente.y estos resultados serán confrontados con la información arrojada por los modelos para establecer eventualmente las limitaciones del planteamiento teórico propuesto .

Como la obtención, interpretación y simulación de curvas de enfriamiento constituyen una parte importante de este trabajo, hemos considerado pertinente incluir, a continuación, algunos aspectos asociados que son relevantes para los objetivos que se han planteado

1.2. ANALISIS DE UNA CURVA TÍPICA DE ENFRIAMIENTO ASOCIADA AL ENFRIAMIENTO Y SOLIDIFICACION DE LA ALEACIÓN EUTÉCTICA AL-SI COLADA EN MOLDES DE ARENA

Una curva de enfriamiento puede ser definida como la representación gráfica que describe la evolución de la temperatura respecto al tiempo para cualquier aleación ²; su importancia radica en el hecho de que los cambios en la tendencia mostradas por las misma coinciden con transformaciones de fase, las cuales ocurren en puntos específicos de temperatura y composición., determinados por las condiciones de proceso

En una curva de enfriamiento típica de una aleación eutéctica Al - Si es posible distinguir tres etapas:

- I Enfriamiento del líquido
- II Solidificación
- III Enfriamiento del sólido

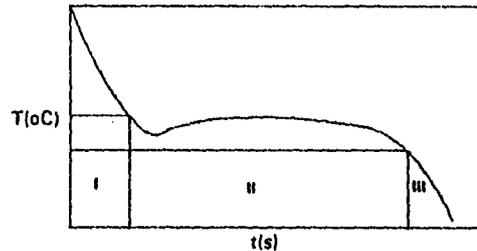


Fig 1. Etapas características de una aleación eutéctica Al - Si

Dentro de la segunda etapa ,correspondiente a la solidificación de la aleación eutéctica , es necesario considerar y definir los siguientes puntos de interés:

- a) Temperatura de solidificación al equilibrio ,(TIS) la cual es determinada por la composición de la aleación para este caso su valor es de 577 grados centígrados.
- b) Temperatura correspondiente al subenfriamiento máximo (TSM) representa el máximo subenfriamiento que alcanza la aleación líquida antes de que se presente la recalentamiento
- c)Temperatura de recalentamiento máxima (TRM) es la máxima temperatura que alcanza la aleación durante su solidificación, la cual nunca sobrepasa la temperatura de solidificación al equilibrio por consideraciones de conservación de energía.
- d) Temperatura de fin de solidificación (TFS) es la temperatura a la cual se agota el líquido remanente y finaliza la solidificación. Esta temperatura nos permite establecer el fin de la

Capítulo I. Posición del problema.

segunda etapa y el inicio de la tercera, es decir indica que la totalidad del volumen de líquido ha sido transformado en sólido.

Los tiempos correspondientes a las temperaturas anteriores permitirán establecer la duración de cada etapa, mismos que son representados como:

- e) tiempo de inicio de solidificación (t_{is})
- f) tiempo final de solidificación (t_{fs})
- g) tiempo asociado al subenfriamiento máximo (t_{sm})
- h) tiempo de recalcancia máxima (t_{rm})
- i) tiempo total de solidificación (t_{ts}) definido como $t_{ts} = t_{fs} - t_{is}$
- j) tiempo total transcurrido (t_{tt}) medido desde el tiempo cero hasta que el metal alcanza la temperatura ambiente.
- k) tiempo de enfriamiento de sólido (t_{es}) el cual equivale a: $t_{es} = t_{tt} - t_{fs}$
- l) tiempo de enfriamiento del líquido (t_{el}) el cual es el tiempo que transcurre desde el tiempo cero hasta que la aleación alcanza la temperatura eutéctica.

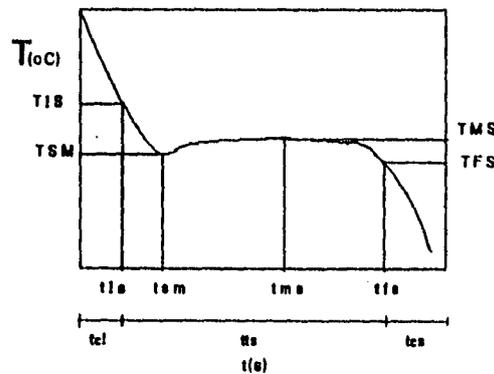


fig 2. Representación esquemática de los puntos característicos de una curva de enfriamiento

Los puntos ya citados nos permiten determinar el papel que desempeña la velocidad de enfriamiento, el espesor de la pieza, la difusividad del material de moldeado así como la temperatura de colada sobre el tamaño de grano final, asimismo nos permitirá realizar un análisis basado en conceptos de transferencia de calor y transformaciones de fase que nos hará posible sugerir algunas propuestas sobre los mecanismos involucrados en la solidificación de eutecticos Al - Si moldeados en arena.

1.3. OBTENCIÓN DE CURVAS DE ENFRIAMIENTO.

El uso del análisis térmico en la industria de la fundición constituye una de las herramientas más utilizadas para el control de calidad. ^{7,8}

Entre las técnicas de análisis térmico más usadas se tienen:

- * Curvas de enfriamiento y curvas de velocidad en enfriamiento
- * Análisis Térmico Diferencial (DTA)
- * Barrido Diferencial Calorimétrico (DSC)

El uso de las curvas de enfriamiento es quizás la técnica más vieja del análisis térmico y consiste básicamente en la medición continua de la temperatura contra el tiempo con el objeto de generar una gráfica en la que se involucren las variables ya mencionadas.

En el punto anterior se mencionaron los puntos de mayor interés mismos que permiten caracterizar adecuadamente una curva de enfriamiento y debido a su difícil determinación se hace necesario obtener la velocidad de enfriamiento, la cual es representada matemáticamente como la primera derivada de la curva de enfriamiento obtenida.

Algunos de los puntos a definir pueden de esta forma ser obtenidos con mayor facilidad ya que coinciden con un punto de inflexión asociado a la velocidad de enfriamiento (dT/dt)

Capítulo I. Posición del problema.

Con el objeto de mejorar los resultados obtenidos a partir del monitoreo de la temperatura se ha propuesto una nueva técnica la cual consiste en el empleo de dos termopares colocados en el metal o aleación.^{1,23}, uno de los cuales es colocado en el centro del sistema y el otro cercano las paredes del molde. Entre las ventajas que se tienen por este método destaca el hecho de que se facilita la determinación de una reacción no detectada por la técnica anterior, empleando condiciones controladas de enfriamiento

Las técnicas DTA y DSC se caracterizan porque en ellas es posible obtener la magnitud de los flujos de calor generados y con ello la fracción volumétrica solidificada. En el caso del DTA la evolución del flujo de calor durante la transformación de fase es determinado a partir de la diferencia de las temperaturas entre la muestra de interés y una referencia.

Para el DSC se usa un principio similar pero en este se incluye una fuente de calor la cual se usa para balancear la diferencia de temperaturas que existe entre la muestra y la referencia por lo que el flujo de calor generado durante la solidificación puede ser evaluado.

Sin embargo aunque las técnicas DTA y DSC proveen de información adicional estas son de uso limitado en Fundición debido a las limitaciones que se tienen en los laboratorios e instalaciones relacionadas a esta industria.

CAPITULO II

PLANTEAMIENTO DE LOS MICROMACROMODELOS

II.1. GENERALIDADES.

Un modelo mecanístico es aquel que representa a un fenómeno por medio de una serie de ecuaciones algebraicas o diferenciales obtenidas a partir de la aplicación de principios de conservación, mismos que nos permitirán obtener una relación causa - efecto entre las variables dependientes e independientes involucradas.

Las partes que constituyen a cada micro - macro modelo son el macromodelo que para este estudio es obtenido a partir de la realización de un balance de energía en el dominio del sistema y el modelo cinético o micromodelo en el que se describe la evolución de algunos parámetros microestructurales como son la evolución de la fracción solidificada, la nucleación y crecimiento de grano equiaxial entre otros. Cabe señalar que para poder ensamblar a cada una de estas partes se recurrirá a la técnica de recuperación de temperatura lo que nos permitirá contabilizar un equivalente térmico asociado al aumento de fracción solidificada.

La diferencia fundamental entre los dos micro - macro modelos que a continuación se describen se centra en la manera en que se plantea el principio de conservación de energía el cual constituye el punto de partida para el planteamiento de los dos modelos elaborados en este trabajo.

En el caso del primer modelo, se parte de un balance global de energía el cual es aplicado a la totalidad del dominio del metal de volumen V (m^3) y área interfacial molde-metal A (m^2).

La totalidad del metal constituye el volumen de control, considerado por definición isotérmico, ya que en un balance global no se considera a variables espaciales.

Lo anterior, junto con el empleo de una solución analítica a la ecuación de Fourier unidimensional, (referida a la evolución del perfil de temperaturas en el molde) la cual nos proporciona una expresión que describe la evolución del flux de calor (W/m^2) que es extraído del metal, a través de la intercara molde-metal, nos permite conocer la respuesta global, térmica y microestructural del sistema, bajo condiciones específicas de proceso.

El planteamiento que resulta del balance global aplicado al metal en las tres etapas consideradas en el proceso, resulta en ecuaciones diferenciales cuya resolución permite simular la evolución de la temperatura con respecto al tiempo.

En el caso del segundo micromacromodelo el dominio compuesto molde metal es discretizado en elementos de control con forma de cilindros anulares, de altura unitaria, y perímetro promedio que depende de la posición del elemento de control con respecto al eje de simetría del sistema y de espesor Δr determinado, constituyéndose en los volúmenes de control alrededor de los cuales se realizarán balances infinitesimales de energía, lo que nos permitirá generar una serie de ecuaciones algebraicas, una para cada elemento de control en el sistema.

En su conjunto, las ecuaciones nodales de todos los elementos de control que constituyen al sistema, generan un sistema de ecuaciones simultáneas cuya resolución nos permitirá conocer la temperatura en función del tiempo y de la posición.

Una situación importante se presenta dentro de la formulación de este segundo modelo y es interesante mencionar que existen dos diferentes técnicas de abordar el problema del campo térmico.^{16,19}

La primera plantea el hecho de que la parte del dominio que involucra al metal se encuentra constituida de dos fases diferentes entre sí que son la fase sólida y la fase líquida, lo que implicaría que las ecuaciones de continuidad deberían ser aplicadas por separado y acopladas mediante el empleo de una ecuación de conservación adicional para la intercara líquido - sólido. A este tipo de tratamiento se le denomina métodos de dos dominios o "front

tracking" y ha sido empleado para el tratamiento de problemas que involucren la solidificación de metales puros y dendritas aisladas en crecimiento.

La otra alternativa consiste en considerar a las dos fases como un dominio único , con cantidades promedio definidas para un volumen de control en el metal, durante la solidificación. Dado que se tienen valores promedio para la entalpia y fracción solidificada sobre diferentes puntos del dominio del metal , y no es necesario emplear una ecuación de conservación de energía adicional en la intercara sólido-líquido, esta técnica ha sido ampliamente aplicada para la simulación de la solidificación de metales puros y de aleaciones que presentan un cierto rango de solidificación. En este trabajo empleamos esta segunda alternativa.

II.2. DESCRIPCIÓN DEL MACROMODELO.

La ecuación que describe al transporte de energía en el medio compuesto molde-metal, considerando como principal mecanismo de transferencia de calor a la conducción es la siguiente:

$$L \frac{\partial f_i}{\partial T} + \nabla (K_i \nabla T) = \rho_i C_p \frac{\partial T}{\partial t} \quad (1)$$

donde T es la temperatura (°C), t es el tiempo (s), K es la conductividad térmica (W/m°C), ρ es la densidad (Kg/m³) , Cp es la capacidad calorífica en (J/Kg °C), L es el calor latente asociado a la solidificación en (J/m³) , fs es la fracción solidificada. y los subíndices iésimos indican la pertenecía al dominio del metal (i=1) o al molde (i=2).

El termino que contabiliza al calor generado debido al cambio de fase es no nulo en el dominio del metal y durante la solidificación.

II.2.1. PLANTEAMIENTO DEL MODELO A PARTIR DE UN BALANCE GLOBAL DE ENERGÍA.

Antes que nada es necesario definir que, el dominio del sistema esta constituido por dos partes una de las cuales corresponde al metal y la otra al material de moldeo y que debido a que la conductividad de la arena es baja con respecto a la del metal, es razonable suponer que el mecanismo controlante será el transporte de energia a través de la misma.

Si el espesor de la capa de arena es lo suficientemente grande para que el extremo opuesto a la interfase molde - metal (la interfase molde- medio ambiente) permanezca a temperatura ambiente podemos asumir que el molde se comporta como un solido semi - infinito. Si ademas consideramos que existe flujo de calor en solo una dirección, y que las propiedades en la arena son constantes, la forma que adopta la ecuación general de conducción para establecer la dependencia de la temperatura en el molde con respecto a la posición y el tiempo es :

$$\frac{\partial T}{\partial t} = \alpha \frac{\partial^2 T}{\partial x^2} \quad (2)$$

y la solución de la ecuación anterior que resulta de las hipótesis mencionadas y que permite evaluar al perfil de temperaturas en el molde en función del tiempo es :

$$\frac{T - T_0}{T - T_m} = \operatorname{erf} \frac{x}{\sqrt{2\alpha t}} \quad (3)$$

Derivando esta ecuación con respecto a x , , evaluándolo en la interfase molde- metal ($x=0$) y aplicando la definición de flux de calor , se obtiene la siguiente expresión, que describe a la evolución del flux de calor en la intercara molde-metal en función del tiempo y en función de la temperatura instantánea de dicha interfase:

$$\frac{dQ}{dt} = \sqrt{\frac{(K \rho C_p)_{arena}}{\pi}} \frac{(T - T_0)}{\sqrt{t}} \quad (4)$$

donde:

$\frac{dQ}{dt}$ es el flux de calor (W/m²) que abandona al metal, supuesto isotérmico , a través de la

intercara molde-metal,

$(K \rho C p)_{arena}$ son las propiedades termo físicas del molde y en su conjunto representan la difusividad del material de moldeo*

T_0 es la temperatura inicial del molde (oC)

T es la temperatura instantánea de la interfase, supuesta igual a la temperatura del metal contenida en el molde

La representación esquemática del perfil de temperaturas que representa al sistema molde metal acorde a estas hipótesis se muestra a continuación:

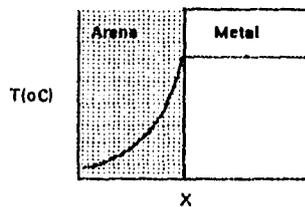


fig.II.1 Perfil de temperaturas para la intercara molde - metal

La ecuación (4) constituye la herramienta que nos permite especificar al calor que abandona al metal en función del tiempo

El siguiente paso para el planteamiento del modelo consiste en la realización del balance de energía por unidad de volumen y para la primera etapa se expresa de la siguiente forma:

$$Q_c = Q_a$$

* No confundir con la difusividad termica del material de moldeo.

Sustituyendo tenemos:

$$-A \frac{dQ}{dt} = \rho V C_p \frac{dT}{dt} \quad (5)$$

La solución de la ecuación (5) nos permite conocer la evolución de la temperatura para el metal durante el enfriamiento del mismo en estado líquido y a partir de la misma es posible establecer el tiempo requerido para iniciar la solidificación.

$$T = T_0 + (T_c - T_0) \exp\left(\frac{-2A}{\rho C_p V} \sqrt{\frac{(K \rho C_p)_{metal}}{\pi}} \sqrt{t}\right) \quad (6)$$

En el caso de la segunda etapa el balance de energía debe realizarse contabilizando el término de calor latente debido a la solidificación.

$$-\frac{A}{V} \frac{dQ}{dt} + \frac{L}{V} \frac{df_s}{dt} = \rho C_p V \frac{dT}{dt} \quad (7)$$

En esta etapa para poder conocer la historia térmica del metal es necesario la resolución simultánea de las siguientes ecuaciones

$$\frac{\partial T}{\partial t} = -\frac{A}{\rho C_p V} \sqrt{\frac{(k \rho C_p)_s}{\pi}} \frac{(T - T_0)}{\sqrt{t}} + \frac{\Delta H_f}{C_p} \left(\frac{\partial f_s}{\partial t}\right) \quad (8)$$

$$\frac{\partial f_s}{\partial t} = \left(\frac{f_{i+1} - f_i}{\Delta t}\right)_{\Delta t \rightarrow 0} \quad (9)$$

con

$$f_i = 1 - \exp\left(-\frac{4}{3} \pi N R_i^3\right) \quad (10)$$

Si observamos con atención la ecuación (9) involucra al incremento de fracción solidificada y esta surge del modelo cinético. La resolución de este sistema de ecuaciones se realiza de forma numérica empleando el método de Euler, lo que nos permite no solo conocer la temperatura del metal sino también la evolución de la fracción solidificada misma que nos permitirá conocer el tiempo de fin de solidificación al adoptar esta el valor de uno.

Para la tercera etapa es necesario de nueva cuenta plantear el balance descrito por la ecuación (5) solo que en este caso se consideran las propiedades termofísicas del metal en estado sólido y de la resolución de la misma se obtiene la siguiente expresión:

$$T = T_s + (T_f - T_s) \exp\left(\frac{-2A}{\rho C_p V}\right) \sqrt{\frac{(K \rho C_p)_{\text{arma}}}{\pi}} \left(\sqrt{t} - \sqrt{t_f}\right) \quad (11)$$

Donde T_f y t_f son la temperatura y tiempo de fin de solidificación respectivamente.

II.2.2. PLANTEAMIENTO DEL MACROMODELO CONSIDERANDO BALANCES INFINITESIMALES DE ENERGIA

Partiendo de la ecuación (1), ya que consideramos que el mecanismo controlante es la conducción de calor y asumiendo las siguientes hipótesis:

- * Flujo de calor unidireccional
- * Propiedades termofísicas del material de moldeo y del metal, en estado líquido y sólido, constantes.
- * En el caso de la etapa de solidificación las propiedades en el metal son consideradas como un promedio ponderado, siendo el término de ponderación la fracción sólida.
- * Se asume que existe un contacto térmico perfecto entre el metal y el molde.
- * Llenado instantáneo del molde.

De acuerdo a lo anterior la ecuación (1) para coordenadas cilíndricas se reduce a:

$$\frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left(r \frac{\partial T}{\partial r} \right) = \frac{1}{\alpha} \frac{\partial T}{\partial t}$$

Las condiciones a la frontera que se asumen son:

$$\text{Si } r = 0 \Leftrightarrow \frac{dT}{dr} = 0$$

$$\text{Si } r = R_t \Leftrightarrow -K \frac{dT}{dr} = h_{\infty} (T_{\infty} - T)$$

Con las siguientes condiciones iniciales:

Si $t = 0$

$$0 \leq r \leq R_m \Leftrightarrow T = T_c$$

$$r > R_m \Leftrightarrow T = T_0$$

II.2.3. RESOLUCIÓN

La resolución de este modelo se realiza utilizando el método de diferencias finitas en el esquema implícito cuya implementación requiere de los siguientes pasos a seguir:

- 1) Discretización del dominio en volúmenes de control.
- 2) Aplicación del principio de conservación de energía a cada volumen de control para obtener la correspondiente ecuación nodal.
- 3) Resolución simultánea de todas las ecuaciones nodales generadas en el paso 2.

El paso inicial de este algoritmo consta de dos partes, la primera consiste en la caracterización de los diferentes volúmenes de control y la segunda radica en obtener las coordenadas características correspondientes a cada nodo.

Dentro del sistema se tienen dos tipos de nodos los "nodos únicos" y las "familias nodales", el primer tipo corresponde a aquellos nodos que se ubican en los extremos del

dominio o en las interfases del sistema y en el segundo se agrupa al conjunto de nodos cuya posición esta definida en el seno de una fase del sistema (metal o arena).

En este caso es posible distinguir tres diferentes "nodos únicos" el adiabático (tipo 1) ubicado en el eje de simetría del sistema molde - metal, el interfacial (tipo 2) que se encuentra en la interfase molde - metal y el convectivo (tipo 3) localizado en la interfase molde - medio convectivo. Las familias nodales reciben el nombre de "M" para las que se encuentran en el seno del metal y "A" si se ubican en la arena.

Para establecer la posición de los nodos dentro del sistema es necesario recurrir a una coordenada característica definida como $i = R_i / \Delta r$ donde R_i es la distancia entre el eje de simetría del medio compuesto molde - metal hasta el centro del volumen de control "i" y Δr es la distancia entre los centros de los volúmenes de control que conforman el sistema.

Es necesario establecer la distancia que limita al dominio del metal, representada por R_m , ya que en esta se ubicará el centro del volumen de control para el nodo interfacial y la distancia total del sistema representada por R_t donde se encontrara el centro del nodo convectivo molde- medio ambiente.

De acuerdo a la anterior convención los diferentes nodos que conforman el sistema se ubican en las siguientes posiciones.

Nodos Únicos	Distancia	Coordenada Característica
Tipo 1	$r = 0$	$i = 0$
Tipo 2	$r = R_m$	$i = R_m / \Delta r$
Tipo 3	$r = R_t$	$i = R_t / \Delta r$

Familias nodales	Ubicación
" M "	$0 \leq i \leq R_m$
" A "	$R_m < i \leq R_t$

En el siguiente paso se obtendrán las ecuaciones nodales por medio de la realización de un balance energía alrededor de cada uno de los volúmenes de control, mismos que serán asociados en una matriz tridiagonal, propia del esquema implícito para problemas en una dimensión.

El desarrollo matemático para la obtención de algunas ecuaciones nodales se muestra en el apéndice "B" , y los resultados obtenidos se enlistan a continuación.

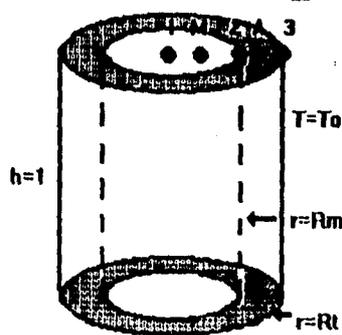


Fig 11.2 Representación esquemática del sistema modo-metal

Ecuaciones para el sistema molde-metal

Coordenadas Cilíndricas

Tipo 1 (eje adiabático)
$$-T''_{i,j} + \left\langle 1 + \frac{l}{4Fo_m} \right\rangle T'_i = \frac{T_i}{4Fo_m}$$

Familia nodal "M"
$$-\left\langle 1 - \frac{1}{2i} \right\rangle T'_{i-1} + \left\langle 2 + \frac{1}{Fo_m} \right\rangle T'_i - \left\langle 1 - \frac{1}{2i} \right\rangle T'_{i+1} = \frac{T_i}{Fo_m}$$

Tipo 2 (interfacial)
$$\left\langle \frac{l}{2i} \right\rangle K_m T'_{i-1} + \left\langle K_m \left\langle \frac{l}{2i} \right\rangle + \frac{l}{Pa^2} + K_s \left\langle \frac{l}{2i} \right\rangle \right\rangle T'_i - \left\langle \frac{l}{2i} \right\rangle T'_{i+1} = \frac{T_i}{Pa^2}$$

Familia nodal "A"
$$-\left\langle 1 - \frac{1}{2i} \right\rangle T'_{i-1} + \left\langle 2 + \frac{1}{Fo_s} \right\rangle T'_i - \left\langle 1 - \frac{1}{2i} \right\rangle T'_{i+1} = \frac{T_i}{Fo_s}$$

Tipo 3 (Convectivo)
$$-\left\langle \frac{l}{2i} \right\rangle T'_{i-1} + \left\langle 1 - \frac{l}{2i} + Bi \frac{l}{2Fo_s} \right\rangle T'_i = \frac{T_i}{2Fo_s} + Bi T_\infty$$

Las ecuaciones anteriores son asociadas a una matriz tridiagonal cuya forma es esquematizada a continuación:

$$\begin{array}{l}
 i=0 \\
 i=1 \\
 : \\
 : \\
 i=n-1 \\
 i=n
 \end{array}
 \left(\begin{array}{cccccc}
 E_0 & F_0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\
 D_1 & E_1 & F_1 & 0 & 0 & 0 \\
 0 & : & : & : & 0 & 0 \\
 0 & 0 & : & : & : & 0 \\
 0 & 0 & 0 & D_{n-1} & E_{n-1} & F_{n-1} \\
 0 & 0 & 0 & 0 & D_n & E_n
 \end{array} \right)
 \left(\begin{array}{c}
 T'_0 \\
 T'_1 \\
 : \\
 : \\
 T'_{n-1} \\
 T'_n
 \end{array} \right)
 =
 \left(\begin{array}{c}
 G_0 \\
 G_1 \\
 : \\
 : \\
 G_{n-1} \\
 G_n
 \end{array} \right)$$

Para la resolución de este sistema ¹⁵ se procede en primera instancia a eliminar la diagonal inferior conformada por los coeficientes D_i , para lo cual el renglón " $i - 1$ " es multiplicado por un factor definido como:

$$FA = \frac{D_i}{E_{i-1}}$$

Lo anterior modificara los coeficientes restantes pertenecientes a esta matriz por lo que:

Para $i = 1$ hasta N

$$E'_i = E_i - FA * F_{i-1}$$

$$G'_i = G_i - FA * T_{i-1}$$

Al eliminar la diagonal inferior es posible obtener la temperatura para el nodo N mediante el siguiente cociente :

$$T'_n = \frac{G_n}{E_n}$$

El siguiente paso consiste en la realización de la sustitución hacia atrás la cual nos permitirá obtener el perfil de temperaturas correspondiente a cada nodo mediante la siguiente relación la cual es valida para $i = N - 1$ hasta 0

$$T'_i = \frac{G_i - FA * F_i}{E_i}$$

II.3. MÉTODO DE RECUPERACIÓN DE TEMPERATURA.

El método que a continuación se describe es aplicable solo en la parte del dominio correspondiente al metal y durante la solidificación , y permite establecer un vinculo entre el macromodelo y el modelo cinético.

El método de recuperación consta de dos etapas : la primera de ellas es la obtención de la(s) nueva(s) temperatura(s) en cada uno de los volúmenes de control que integran el dominio del sistema ,considerando que no hay cambio de fase.

Esta temperatura es utilizada para calcular el subenfriamiento presente en el volumen de control , del cual depende el incremento del numero y radio de núcleos activos lo que a su vez están en relación directa con la fracción solidificada.

El calor liberado asociado al punto anterior es contabilizado en un equivalente térmico mismo que es sumado a la temperatura obtenida a raíz de la primera etapa obteniéndose de esta manera una temperatura "corregida" la cual corresponderá al paso de tiempo actual.

Resumiendo el algoritmo:

Paso I.. Resolución de la ecuación diferencial

$$\nabla (K \nabla T) = \rho C_p \frac{\partial T}{\partial t}$$

Paso II. Corrección de la(s) temperatura(s) calculada(s) para evaluar la aportación del calor latente debido al incremento de fracción solidificada.

$$T_i^{i+\Delta t} = T_i^{i-\Delta t} + \frac{\Delta H}{C_p} \Delta f_i$$

II.4. MODELO CINÉTICO

II.4.1 Fundamentos.

Dentro del metal líquido existe una distribución de varios tipos de partículas las cuales actúan como sustratos para la nucleación heterogénea. De acuerdo a la teoría clásica de nucleación existe un tamaño crítico que estos sustratos deben alcanzar representada por la siguiente función.

$$AB = l^* = \frac{4\gamma_{cl} T_E \text{sen } \theta}{\Delta H \Delta T}$$

donde ΔH es el calor de fusión

ΔT es el subenfriamiento

γ es la energía de superficie de la interfase liquido-embrión

θ es el ángulo de contacto

T_E es la temperatura de transformación eutéctica

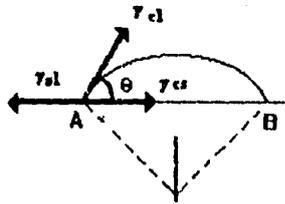


Fig II.3 Configuración de equilibrio para un núcleo en un sustrato

Sin embargo trabajos recientes de Fras y Rappaz ^{4,19} han establecido que esta teoría es inadecuada para predecir la velocidad de nucleación en su comparación con los resultados experimentales y han sugerido para tal fin asumir una distribución continua de sitios de nucleación haciendo un desarrollo estadístico para adaptarlo al modelado matemático.

Si se considera una distribución gaussiana la densidad de sitios de nucleación heterogénea $N(l)$ será:

$$N(l) = \frac{N}{s\sqrt{2\pi}} \exp\left\{-\frac{(l-b)^2}{2s^2}\right\}$$

N es la densidad de sitios de nucleación

s es la desviación standard de la distribución.

b es el subenfriamiento medio

Para la obtención de la densidad de los substratos activos de acuerdo a la distribución propuesta es necesario integrar desde el subenfriamiento máximo (ΔT_m) hasta cero.

$$N_m = \int_0^{\Delta T_m} \frac{N}{s\sqrt{2\pi}} \exp\left\{-\frac{(l-b)^2}{2s^2}\right\} dl$$

Desafortunadamente esta función no es integrable y los factores s y b deben ser obtenidos de manera experimental. Alternativamente dado que menos de la mitad de la distribución toma parte efectiva del proceso de nucleación una simplificación es posible si se considera una ley empírica de la forma ⁵:

$$N = \psi \Delta T^k$$

Donde ψ y k son constantes determinadas experimentalmente y ΔT es el grado de subenfriamiento. Esta relación ha sido confirmada experimentalmente por otros investigadores ^{12,16}

Esto nos posibilita dentro de un intervalo de tiempo Δt obtener la cantidad de sitios de nucleación formados para un volumen de control a través de la relación siguiente:

$$\Delta N_i = N_i^{(t+\Delta t)} - N_i^t$$

Se asume que la nucleación cesa al inicio de la recalcificación

Al igual que la velocidad de nucleación la velocidad de crecimiento de grano es dependiente del subenfriamiento y es expresada en términos de la siguiente relación

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

donde μ es la constante decrecimiento eutéctico (m/s °C²) y cuyo valor reportado por Magnin es de 1.0685E-5 (m/s°C)¹⁸

De esta expresión es posible calcular el incremento en el tamaño de grano como:

$$\Delta R_i = \frac{dR}{dt} \Delta t$$

Misma que nos servirá para calcular la fracción solidificada sin considerar interacciones entre granos ⁴definida como:

$$X_i = \frac{4}{3} \pi [N_i^t (R_i^t + \Delta R_i)^3 + (\Delta N_i \Delta R_i^3)]$$

Considerando lo anterior la relación que describe a la fracción solidificada verdadera, tomando en cuenta el interbloqueo entre granos en crecimiento en un volumen de control es expresada mediante la ecuación de Johnson - Mehl.

$$f_s = 1 - \exp(-X_i)$$

Una vez conocida la fracción solidificada en el tiempo actual es posible obtener el incremento de esta así como la velocidad de formación de sólido

$$\Delta f_s = f_s^{(t+\Delta t)} - f_s^t$$

$$\frac{df_s}{dt} = \frac{f_s^{t+\Delta t} - f_s^t}{\Delta t}$$

El planteamiento de la evolución del radio de grano eutéctico se muestra a continuación. En el tamaño de grano se define un radio promedio obtenido a partir del factor X_i asumiendo que los núcleos tienen una geometría esférica:

$$\bar{R}_i^{t+\Delta t} = \sqrt{\frac{3 X_i}{4 \pi}}$$

Este modelo será vigente hasta que la fracción solidificada alcance el valor de uno.

FALTA PAGINA

No 32.a la.....

fueron calculados a partir de información experimental disponible de trabajos anteriores y el número de sitios a considerar en cada caso se introdujo bajo la forma de un factor multiplicativo que denominamos factor de nucleación.

El segundo programa que fue elaborado, asociado al micro macro modelo que parte del balance infinitesimal de energía aplicado al medio compuesto molde-metal , fue concebido con el fin básico de determinar la diferencia entre las respuestas térmica y microestructural que existen en diferentes zonas de la pieza , debido a la existencia de gradientes térmicos en el metal.

Como datos, este programa requiere de los valores que definen a las variables de proceso mencionadas anteriormente y también del tamaño de malla y del paso de tiempo requeridos.

De acuerdo con lo anterior, el despliegue de resultados incluye el trazado y caracterización de las curvas de enfriamiento asociadas a uno ó varios nodos dentro del dominio del metal, junto con el tamaño local de grano correspondiente.

Mediante el empleo de este segundo programa es posible establecer el efecto que tiene cada una de las variables de proceso sobre el tamaño de grano y la curva de enfriamiento , en función de la posición dentro del dominio del metal y la información proporcionada permite proponer algunas hipótesis que nos permiten comprender de una forma mas detallada al sistema.

Cabe mencionar que los resultados obtenidos de estos modelos fueron empleados como una referencia importante para establecer las condiciones en que se realizó el trabajo experimental.

A continuación se muestran los resultados que arrojaron estos modelos para los diferentes casos que fueron considerados

III.2 RESULTADOS OBTENIDOS DEL MODELO DE BALANCE GLOBAL

Para obtener los efectos de las diferentes variables de proceso sobre el tamaño de grano y la curva de enfriamiento se procedió a emplear el programa obteniendo , la información generada por el modelo, y considerando ,en cada caso ,diferentes valores para la variable de interés , manteniendo constante el resto de las condiciones de proceso

Antes de mostrar los resultados arrojados por el modelo ,es conveniente comentar la relación que existe entre la fenomenología del proceso y los diferentes parámetros térmicos y cinéticos tal y como se desprende de las consideraciones empleadas para el planteamiento de los modelos que fueron elaborados en este trabajo .

El proceso inicia con el llenado del molde de arena con aleación líquida y al inicio del enfriamiento, y debido al choque térmico inicial entre la aleación líquida, a la temperatura de colada y el material de moldeo, a temperatura ambiente, el gradiente térmico en la intercara molde metal adopta sus valores más elevados, por lo que el flujo de calor extraído por el material de moldeo, Q_c , adopta también los valores mas altos lo cual provoca que en estos primeros instantes se observen las mayores caídas de temperatura del metal por unidad de tiempo (curvas dT/dt y T).

A medida que este proceso continúa y debido a la baja difusividad térmica del molde, las regiones de éste en la vecindad inmediata de la intercara molde-metal se saturan térmicamente de una manera progresiva, lo cual disminuye gradualmente el gradiente térmico en la intercara molde-metal y con esto , disminuye paulatinamente Q_c .

Esta tendencia continúa hasta que la aleación alcanza la temperatura eutéctica e inicia la solidificación. Al inicio de esta etapa el reducido flujo de calor latente liberado por los pocos núcleos activos que realizan su crecimiento a bajos subenfriamientos provoca una disminución relativamente pequeña en la velocidad de enfriamiento de la aleación la cual continua siendo negativa con lo que el sistema prosigue disminuyendo su temperatura, aunque a una velocidad cada vez menor.

A medida que aumenta el subenfriamiento se incrementa la cantidad de embriones que alcanzan su dimensión crítica y aumenta la velocidad de crecimiento de los núcleos preexistentes (dR/dt), la velocidad de formación de sólido (dfs/dt) y en consecuencia la velocidad de liberación de calor latente, Q_s , lo cual se traduce en valores cada vez menos negativos de dT/dt y en una disminución cada vez más lenta en la temperatura de la aleación por unidad de tiempo hasta que llega un momento de la solidificación en que el flujo de calor latente liberado se iguala con el flujo de calor extraído por el material de moldeo y la aleación alcanza su máximo subenfriamiento.

A partir de este momento y debido a que en este instante la velocidad de crecimiento dR/dt es máxima, la velocidad de formación de sólido continua incrementándose lo cual provoca que Q_s exceda a Q_c y se presente la recalcancia, con valores de dT/dt positivos. Debido a la disminución en el subenfriamiento del líquido remanente y en consecuencia la disminución en la velocidad de avance de la intercara sólido-líquido, la velocidad de formación de sólido, dfs/dt , Q_s y dT/dt crecen cada vez con mayor lentitud y esta tendencia continua hasta que se presenta un máximo en los tres parámetros, el cual coincide en el tiempo con el punto de inflexión de la curva asociada a la temperatura de la aleación durante la recalcancia.

A partir de este momento los tres parámetros comienzan a disminuir bajo el efecto de un subenfriamiento y una velocidad de avance de la intercara cada vez menores y esta tendencia continua hasta que nuevamente Q_s y Q_c se igualan, en el punto que corresponde al máximo de la curva de enfriamiento.

A partir de este momento y debido al cada vez más marcado interbloqueo entre granos y al progresivo agotamiento del líquido remanente la velocidad de formación de sólido disminuye, manteniendo los valores de Q_s por debajo de Q_c por lo cual la aleación continua con una disminución de temperatura hasta que el líquido remanente se agota por completo y termina la solidificación.

III.2.1. EFECTO DE LA TEMPERATURA DE COLADA

Para simular la influencia de esta variable se aplicó el modelo considerando temperaturas de colada de 670, 720 y 770 °C para un diámetro de cilindro de 1 cm con una difusividad de material de moldeo de $600 \text{ J/m}^2\text{s}^{1/2} \text{ C}$ y un factor de nucleación de uno.

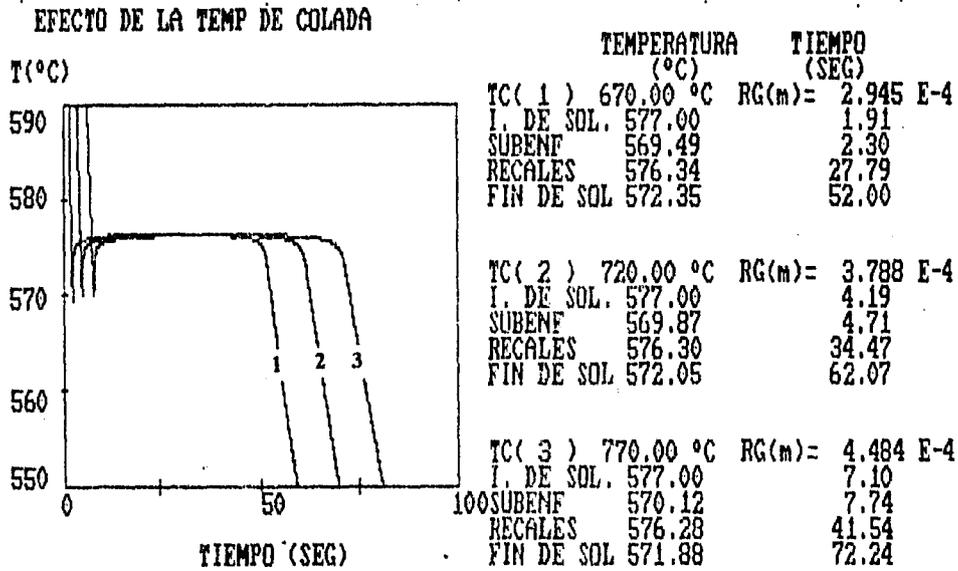


Figura III.1 Efecto de la temperatura de colada sobre el tamaño de grano y la curva de enfriamiento

Las tendencias mostradas por el modelo , que se pueden apreciar en la figura III.1 indican que conforme se incrementa la temperatura de colada , se provoca :

Capítulo III. Aplicación de los micromacromodelos a la simulación del efecto de las condiciones de proceso sobre el tamaño de grano y las curvas de enfriamiento asociadas.

- * Un incremento en los tiempos que definen los puntos característicos de una curva de enfriamiento.
- * Un menor grado de subenfriamiento, es decir la temperatura de subenfriamiento máximo aumenta.
- * Las temperatura de recalcencia máxima disminuye ligeramente.
- * La temperatura de fin de solidificación es menor.
- * El numero de núcleos formados disminuye
- * El tamaño de grano aumenta

III.2.2 EFECTO DEL ESPESOR DE LA PIEZA

Para la simulación del efecto de esta variable se consideraron diámetros de cilindro de 0.8, 1.0 y 1.2 cm para una temperatura de colada de 720 °C, una difusividad para el material de moldeo de $600 \text{ J/m}^2\text{s}^{1/2} \text{ C}$ y un factor de nucleación unitario.

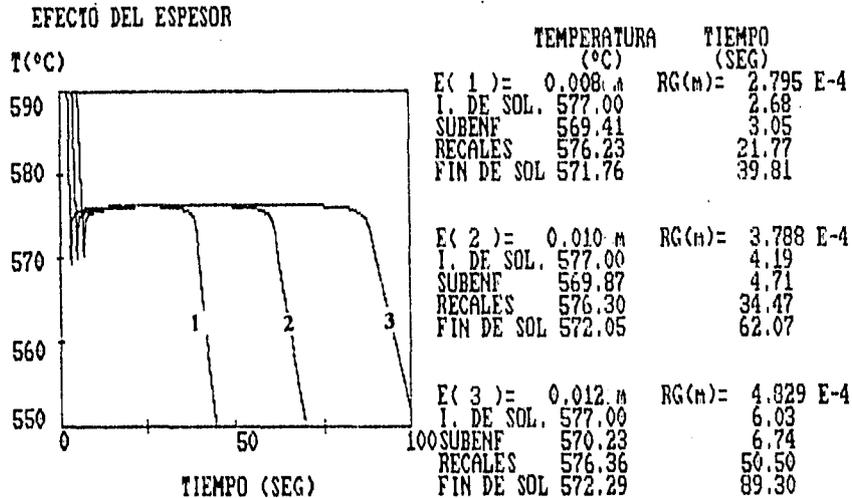


Figura III.2 Efecto del espesor de la pieza sobre el tamaño de grano y la curva de enfriamiento

Los resultados generados por el modelo, mostrados en la figura III.2 indican que un mayor espesor de pieza provoca:

Capítulo III. Aplicación de los micromacromodelos a la simulación del efecto de las condiciones de proceso sobre el tamaño de grano y las curvas de enfriamiento asociadas.

- * Un aumento en los tiempos correspondientes a los puntos que definen a la curva de enfriamiento.
- * Una disminución en el grado de subenfriamiento, en otras palabras la temperatura de subenfriamiento máximo aumenta.
- * Una temperatura de recalcancia máxima ligeramente mayor
- * Mayores temperaturas asociadas al fin de solidificación.
- * Una menor formación de sitios de nucleación.
- * Un mayor tamaño de grano

III. 2.3-EFECTO DE LA DIFUSIVIDAD DEL MATERIAL DE MOLDEO:

Para establecer la influencia de esta variable se propusieron valores de 500, 600 y 700 $J/m^2s^{1/2} C$ para una temperatura de colada de 720 °C, un diámetro de cilindro de 1.0 cm y un factor de nucleación unitario.

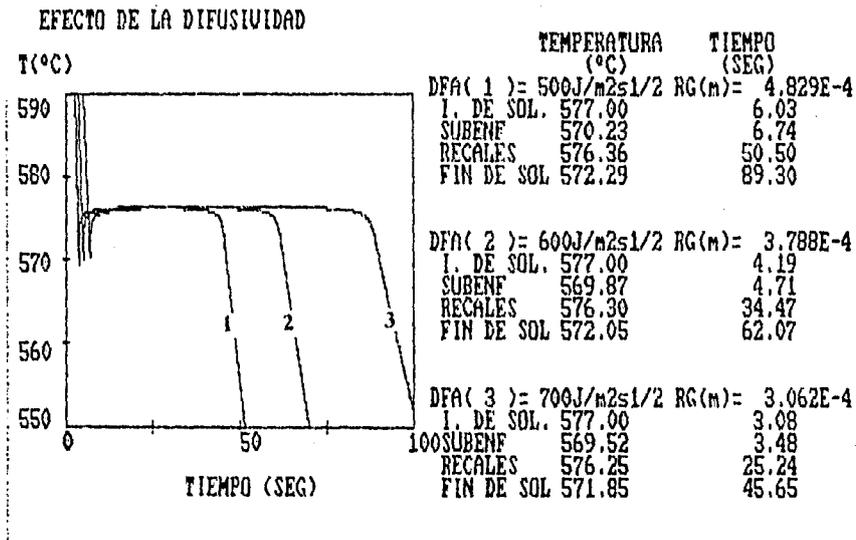


Figura III.3 Efecto de la difusividad de calor del material de moldeo sobre el tamaño de grano y la curva de enfriamiento

Al introducir los parámetros anteriores al modelo, los resultados obtenidos, que se presentan en la figura III.3 muestran que un aumento en la difusividad de calor del material de moldeo implica:

- * Una disminución en los tiempos inherentes a los puntos característicos de la curva de enfriamiento asociada a la solidificación del eutéctico Al - Si.
- * Un aumento en el grado de subenfriamiento lo que es equivalente a decir que la temperatura de subenfriamiento máximo disminuye.
- * La temperatura de recalcancia máxima disminuye.
- * La temperatura de fin de solidificación es menor.
- * Una mayor cantidad de sitios de nucleación.
- * Favorece la obtención de un tamaño de grano chico.

III. 2. 4. EFECTO DEL NUMERO DE SITIOS DE NUCLEACIÓN.

Con el fin de observar cual es el efecto de esta variable sobre la curva de enfriamiento y en el tamaño de grano, se introdujeron al programa valores del factor de nucleación de uno, que corresponde a la ecuación empírica de nucleación considerada originalmente por el programa, y de 100 asociado a una cantidad de sitios de nucleación cien veces mayor.

Los valores asociados al resto de las variables fueron: temperatura de colada 720 °C; diametro 1.0 cm. y difusividad de calor del material de moldeo $600 \text{ J/m}^2\text{s}^{1/2} \text{ C}$, obteniendo los gráficos mostrados en las figuras III.4 y III.5 los cuales indican que un incremento en el número de sitios de nucleación propicia:

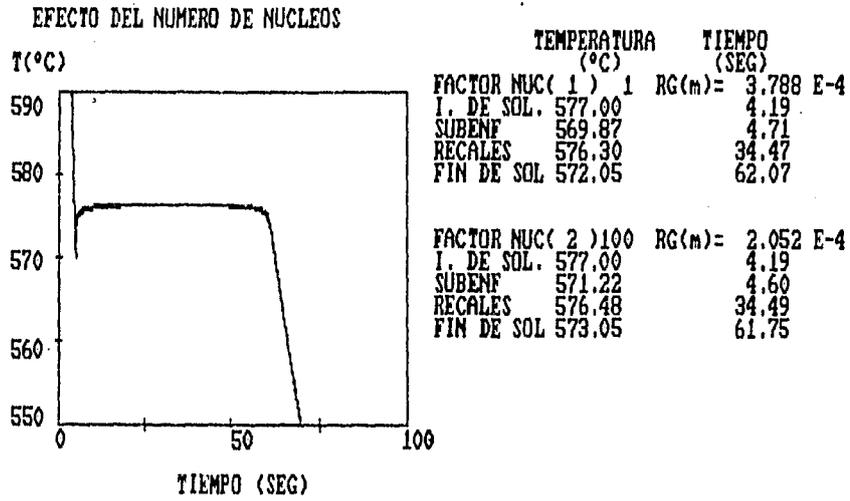


Figura III.4 Efecto del número de núcleos activos sobre el tamaño de grano y la curva de enfriamiento

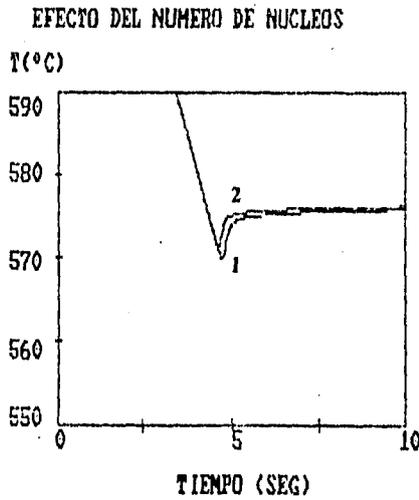


Figura III.5 Efecto del número de núcleos activos sobre el tamaño de grano y la curva de enfriamiento (Ampliación de la figura anterior)

Capítulo III. Aplicación de los micromacromodelos a la simulación del efecto de las condiciones de proceso sobre el tamaño de grano y las curvas de enfriamiento asociadas.

- * Un ligero aumento en los tiempos que definen los puntos característicos de una curva de enfriamiento, salvo en el tiempo inicial de solidificación.
- * Un menor grado de subenfriamiento debido a que la temperatura de subenfriamiento máximo aumenta.
- * Una mayor temperatura de recalcancia.
- * Una temperatura de fin de solidificación mayor
- * Un menor tamaño de grano.

III.3. RESULTADOS OBTENIDOS DEL MODELO QUE CONSIDERA GRADIENTES INTERNOS DE TEMPERATURA

Los resultados que se muestran a continuación fueron obtenidos considerando un radio de cilindro de 1 cm, un espesor de la capa de arena que rodea al cilindro de 2 cm, y un tamaño de malla de 0.2 cm (21 nodos):

Las condiciones de proceso fueron: temperatura de colada 720 °C, temperatura ambiente de 25 °C, coeficiente de transferencia de calor aire - arena fue de 1.06 W/m °C y propiedades termofísicas para el metal y arena ya establecidas en el apéndice C..

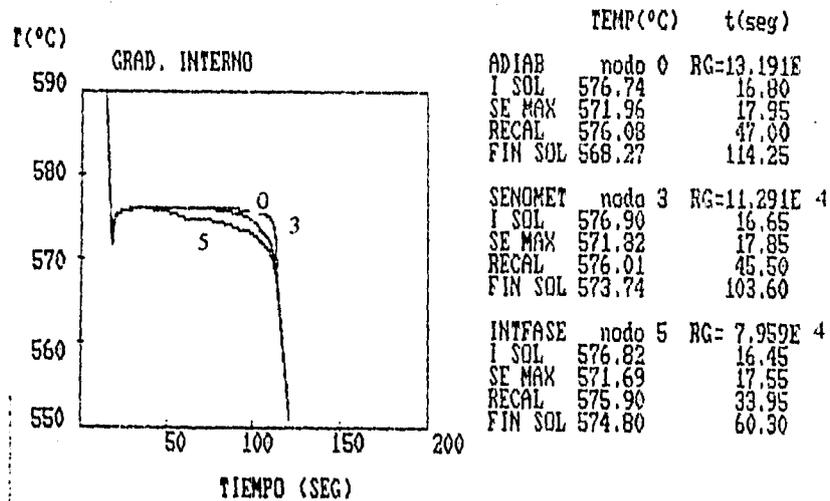


Figura III.6 Efecto de la posición dentro de la pieza sobre el tamaño de grano y la curva de enfriamiento

Los resultados que se muestran en la figura III.6 fueron generados para los nodos , 0, 3 y 5 que corresponden al eje de simetría (nodo tipo adiabático), al seno del metal (zona intermedia entre el eje de simetría y la interfase molde-metal) y al nodo ubicado en la interfase molde-metal , respectivamente

En esta figura es posible apreciar que existe una diferencia evidente para las historias térmicas que corresponden a diferentes zonas en el metal, de donde resulta la diferencia en la respuesta microestructural en función de la posición dentro de la pieza , como se puede constatar en los radios de grano correspondientes a cada uno de los nodos considerados.

Una diferencia importante entre las curvas generadas por el modelo anterior y las obtenidas con este modelo, reside en que , este modelo, al considerar la respuesta local muestra que los nodos ubicados en la vecindad inmediata de la interfase molde metal no disminuyen drásticamente su temperatura al finalizar su solidificación , sino que se observa una disminución muy lenta de la temperatura hasta que los nodos más internos terminan su solidificación. Esto se puede explicar debido a que el calor latente liberado por las regiones internas de la pieza , tiene que pasar a través de la región que ya ha solidificado provocando este efecto.

Ahora enlistaremos las tendencias mostradas para los nodos ya mencionados a fin de establecer la influencia de la posición sobre la curva de enfriamiento y el tamaño de grano.

Conforme nos ubicamos mas cerca de la arena es posible apreciar que:

- * Los tiempos que definen a los puntos característicos de una curva de enfriamiento se reducen y por consecuencia la duración de las etapas.
- * El grado de subenfriamiento aumenta es decir la temperatura de subenfriamiento máximo disminuye.
- * La temperatura asociada a la recalcancia máxima es menor.
- * La temperatura de fin de solidificación es menor
- * La formación de una mayor cantidad de sitios de nucleación es favorecida
- * Se tendrá un menor tamaño de grano

CAPITULO IV

DESARROLLO Y RESULTADOS EXPERIMENTALES

Una vez que se ha obtenido de los micro-macromodelos la influencia de cada una de las variables de proceso sobre el tamaño de grano y sobre las curvas de enfriamiento asociadas resta corroborar experimentalmente estas propuestas.

En este capítulo se describe al arreglo experimental y a la metodología empleada para generar la información experimental requerida. Asimismo se presentan los resultados obtenidos, su comparación con la información arrojada por los modelos bajo las mismas condiciones de proceso y la discusión de las concordancias y discrepancias encontradas.

IV.1 DESCRIPCIÓN DEL ARREGLO EXPERIMENTAL

El arreglo experimental que constituyo el antecedente básico de lo adoptado en este trabajo corresponde a Oldsfield , quien en su artículo "Chilling Mechanism of Chromium in Cast Iron" ⁵ presenta un arreglo de seis cilindros de diferentes diámetros cuyas magnitudes de menor a mayor son de 12.7, 15.2, 19.1, 25.4, 33.0 y 63.5 mm . Cada una de las piezas ya señaladas se encuentran ubicadas en un patrón hexagonal con una bajada central la cual permite la alimentación de metal a los cilindros desde abajo hacia arriba. y donde se tiene la presencia de colchones justo abajo de cada cilindro

Cabe hacer la aclaración que en la construcción de este arreglo experimental, considerando nuestros fines, se optó por suprimir tres de los seis cilindros que Oldsfield propuso originalmente por lo que los corredores de nuestro diseño experimental se ubican a 120 ° uno respecto a otro.

Un esquema del diseño experimental empleado en este trabajo se presenta a continuación:

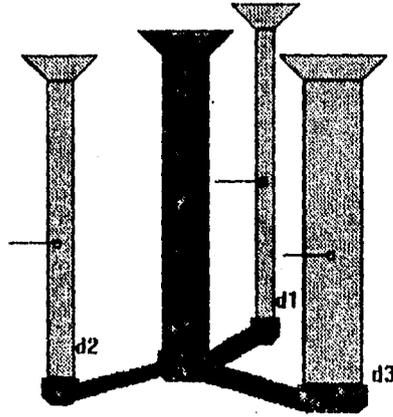


Figura IV.1. Representación esquemática del arreglo experimental empleado.

La obtención de las curvas de enfriamiento fue realizada adoptando la siguiente metodología :

El primer paso consistió en la fabricación del molde a partir del diseño experimental ya descrito en el punto anterior . Esto fue llevado cabo mediante la adopción de un sistema de moldeo que implica la sobreposición de tres cajas teniendo dos líneas de partición

En la primera caja la parte inferior de nuestro dispositivo el cual contiene a los colchones y corredores fue impresa en arena de careo.

La segunda caja contiene la mitad de los cilindros incluyendo el que servirá de bajada los cuales son montados y fijados sobre pequeños orificios realizados en la placa y que a su vez se ensamblan por medio de una pequeña protuberancia coincidente.

Una vez que se ha terminado de moldear esta parte se procede a realizar , pequeños canales por los cuales los termopares serán colocados a fin de registrar la temperatura de cada una de las piezas. Posteriormente se procede a moldear la parte superior del cuerpo de los cilindros.

Una vez que se ha terminado de moldear se procede a quitar los cilindros que dieron forma al molde para lo cual se recurre a un tornillo el cual es insertado a la parte superior de cada modelo el cual presenta un orificio con cuerda en su interior y permite ejercer una fuerza que logre extraer al modelo.

A continuación se quita la placa y se vuelve a colocar una caja de moldeo sobre otra, resaltando el hecho de que antes de sobreponer la tercera caja se introducen los termopares en los canales realizados para tal fin.

Estos son colocados en el centro del lugar que darán forma a cada uno de los cilindros y en algunos casos se utilizará un termopar adicional en la interfase molde- metal para poder establecer el efecto de la posición sobre la curva de enfriamiento.

Una vez que los termopares se han colocado en su posición dentro del molde, se conectan a un graficador continuo llamado comercialmente "Speedomax" el cual permite programar los rangos de temperatura sobre los que se desea graficar así como asignar un color de tinta para cada curva de enfriamiento a la vez que es posible registrar hasta quince mediciones de temperatura simultáneamente.

El graficador indica la velocidad a la cual realiza el registro en unidades de tiempo sobre distancia la cual sirve de referencia para conocer el tiempo y que en nuestro caso en particular fue de 180 cm/h.

Por otra parte es necesario señalar que los termopares utilizados para la realización de estos experimentos son del tipo "K" (cromel-alumel).

Una vez que se ha concluido con la parte correspondiente al moldeo se procede a preparar la carga, de composición química controlada (12.6% en peso de Si), para lo cual es necesario limpiarla, cortarla, se verifica que no contenga humedad y se precalienta para después introducirla al horno en el cual se realizará la fusión. una vez que este ha alcanzado la temperatura adecuada. El horno utilizado para estos experimentos fue el de inducción disponible en el laboratorio de Fundición de la Facultad de Química.

Dentro del tratamiento de metal líquido una vez que este se ha fundido totalmente se tiene que desgasificar a fin de minimizar la presencia de hidrógeno disuelto en el baño metálico, para lo cual se insufla argón por espacio de ocho minutos luego de los cuales el metal está listo para vaciarse una vez que se tenga la temperatura adecuada.

Posteriormente se saca al crisol del horno y se coloca en el manual, se desescorifica y se registra la temperatura del metal para asegurarse de que este será vaciado a la temperatura de colada previamente establecida.

Alcanzada la temperatura de colada se procede a vaciar rápidamente registrándose las curvas de enfriamiento para cada cilindro y posteriormente se espera a que el metal alcance la temperatura ambiente para desmoldear.

Una vez que se tiene la pieza se procede a cortarla transversalmente aproximadamente a una distancia de dos centímetros arriba y abajo respecto a la posición del termopar., con el fin de poder realizar su preparación metalográfica tendiente a observar cualitativamente el tamaño de grano.

La preparación de las piezas obtenidas consiste en lijar la superficie de interés de las probetas hasta lija 600, para posteriormente realizar un macroataque introduciéndolas en una solución de cloruro de cobre para posteriormente realizar la inmersión de las mismas en una mezcla de ácido fluorhídrico y nítrico en relación 6:1

IV.2 RESULTADOS EXPERIMENTALES.

Con el fin de comparar las tendencias predichas por los modelos propuestos en este trabajo con evidencia experimental, se procedió a emplear el arreglo mencionado.

Para la elaboración de los moldes se empleó una mezcla de arena de moldeo con 10% de bentonita, 4% de humedad y el resto de arena sílica de tamaño AFS 80-90. La compactación del molde, para garantizar condiciones similares, se controló mediante mediciones de dureza superficial.

Se introdujeron termopares tipo K en el centro geométrico de los cilindros, de 30 cm de altura y 1.4 cm, 2.2 cm y 3.5 cm de diámetro respectivamente.

En la figura IV.2 se muestran las probetas resultantes, macroatacadas mediante inmersiones alternadas en solución de cloruro de cobre al 20% y en una mezcla de ácido nítrico y ácido fluorhídrico 6:1, en la figura IV.3 se muestran las curvas de enfriamiento obtenidas para una temperatura de colada de 720 °C, para los tres cilindros considerados,

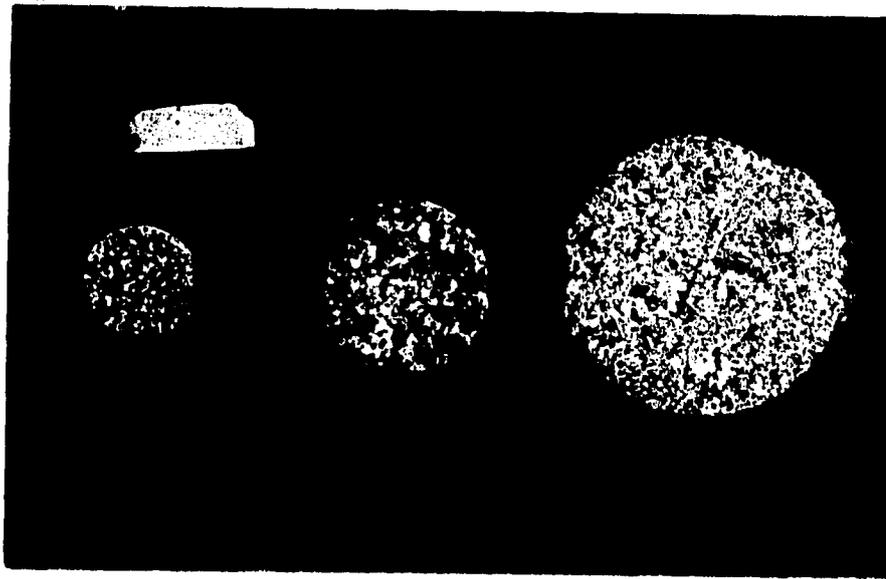


Figura IV.2.-Probetas macroatacadas de los cilindros colados a 720°C

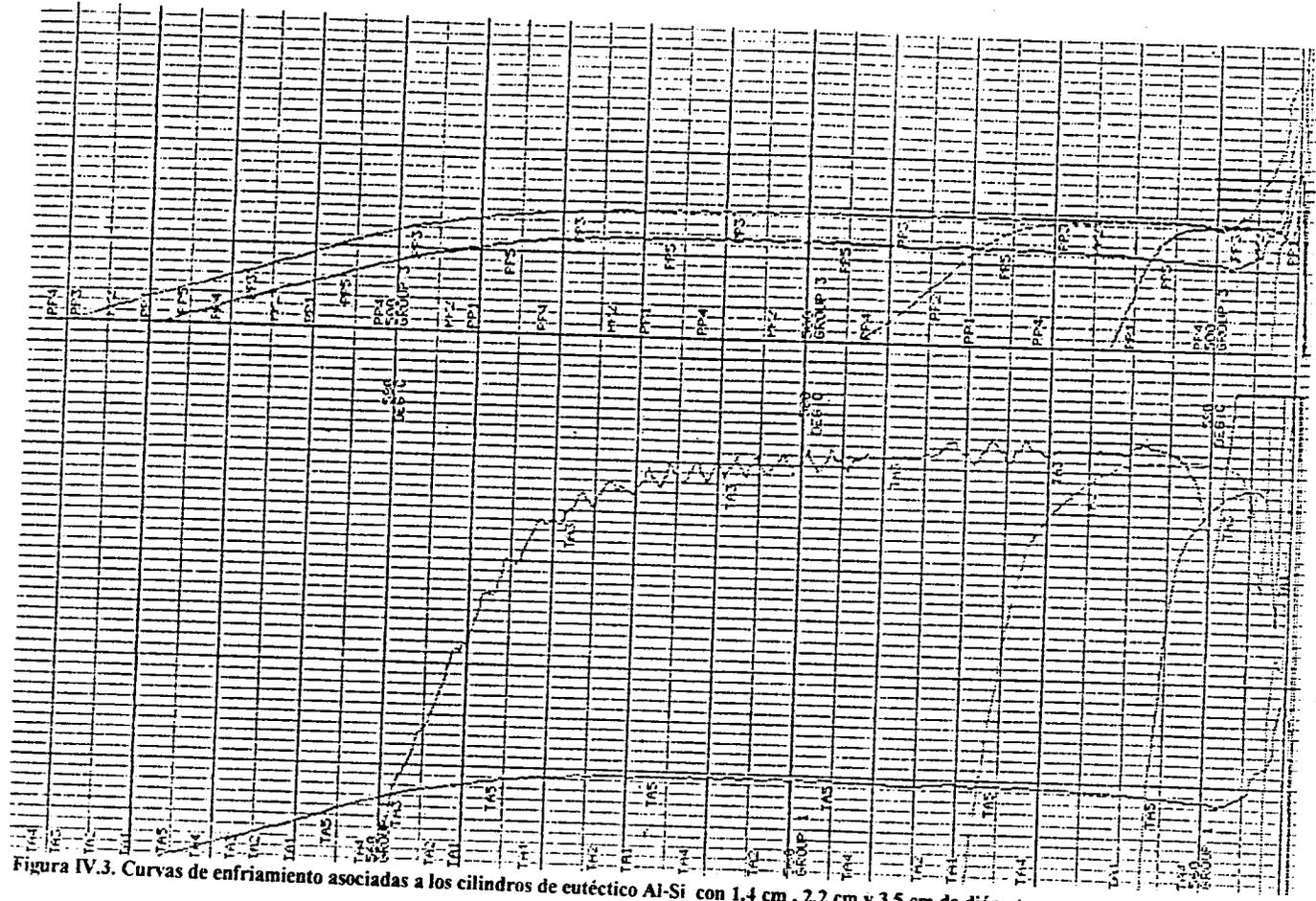


Figura IV.3. Curvas de enfriamiento asociadas a los cilindros de eutéctico Al-Si con 1.4 cm , 2.2 cm y 3.5 cm de diámetro respectivamente colados a una temperatura de 720 oC

En la figura IV.4 se muestran a las probetas resultantes, macroatacadas y en la figura IV.5 se muestran las curvas de enfriamiento obtenidas para una temperatura de colada de 670 °C, para los tres cilindros considerados

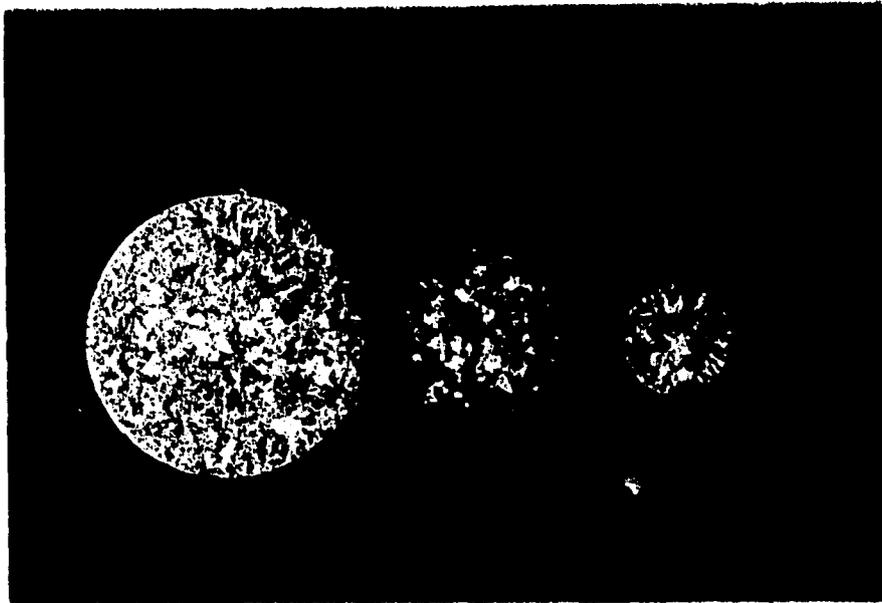


Figura IV.4.-Probetas macroatacadas de los cilindros colados a 670oC

En la fig. IV.2, al comparar las probetas que corresponden a 1.4 cm y 2.2 cm de diámetro se puede observar una tendencia clara a la disminución del tamaño de grano conforme disminuye el diámetro del cilindro, sin embargo esta diferencia no es evidente al comparar en la misma fotografía las probetas de 2.2 y 3.5 cm de diámetro.

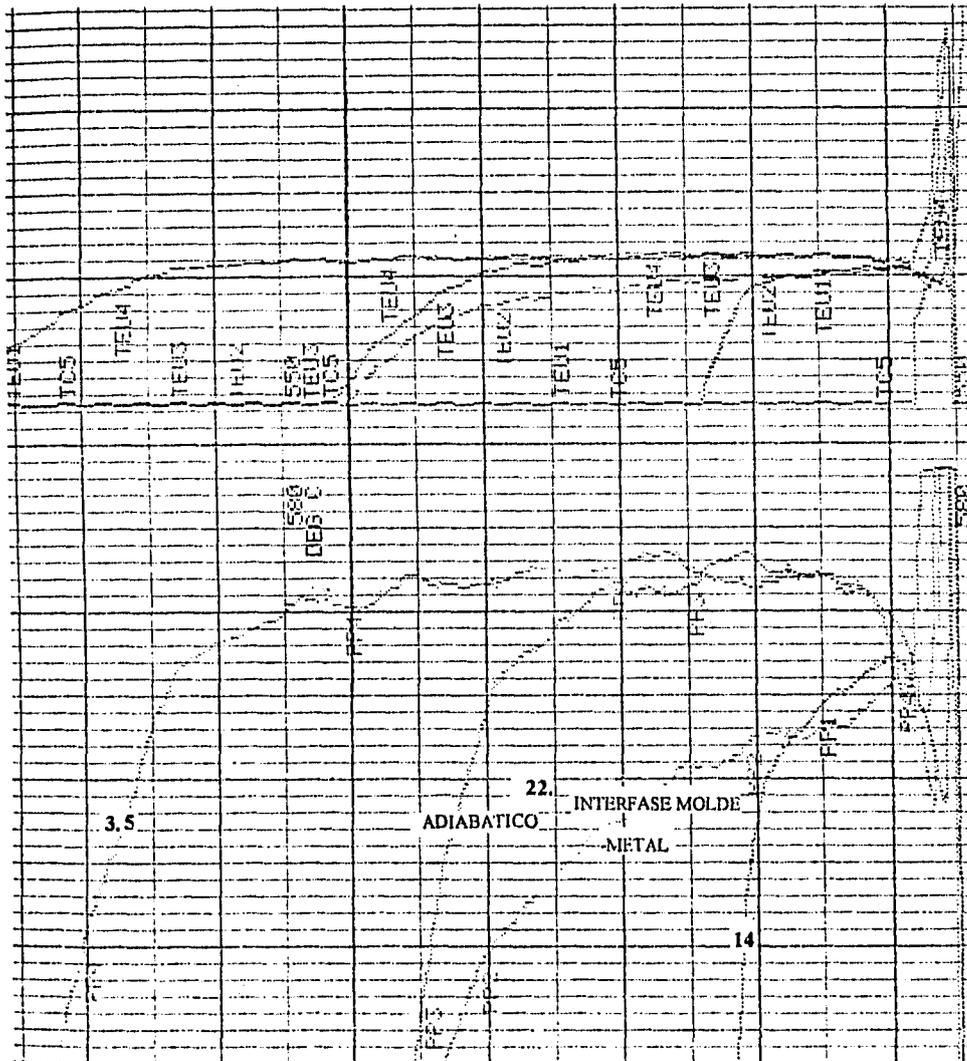


Figura IV.5 Curvas de enfriamiento asociadas a los cilindros de eutéctico Al-Si con 1.4 cm , 2.2 cm y 3.5 cm de diámetro respectivamente colados a una temperatura de 670 oC

En el caso de las muestras coladas a 670 °C, mostradas en la fig IV.4, se puede observar , en la muestra de 1.4 cm de diámetro la presencia de una zona columnar en la periferia de contacto molde-metal, y en el centro una zona equiaxial.

Comparando las macroestructuras que presentan los cilindros de 3.5 cm de diámetro para una temperatura de colada de 720oC (fig.IV.2) y 670oC (fig IV.4) , se observa que presentan macroestructuras similares.

En la figura IV.6 se muestra una ampliación de las curvas de enfriamiento obtenidas para el cilindro de 2.2 cm de diámetro en donde se señalan a las curvas de enfriamiento que corresponden al centro del cilindro y a la interfase molde-metal

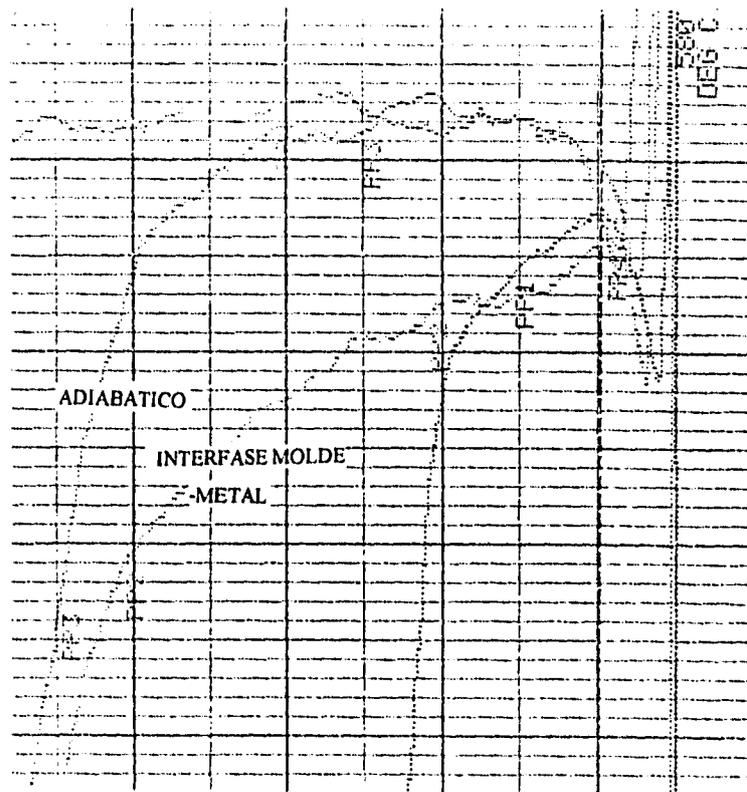


Figura IV.6 Curvas de enfriamiento asociadas al centro y a la interfase molde-metal para el cilindro de eutéctico Al-Si con 2.2 cm de diámetro colado a una temperatura de 670 oC

IV.3 COMPARACION EXPERIMENTO--MODELOS.

Se empleó a los modelos elaborados para generar las curvas de enfriamiento y los tamaños de grano bajo las condiciones experimentales mencionadas en la sección anterior, obteniendo , para una temperatura de colada de 720 °C, las curvas de enfriamiento mostradas en la figura IV.7 , obtenidas para los tres cilindros considerados, en donde tambien se muestran los tamaños de grano predichos por el modelo.

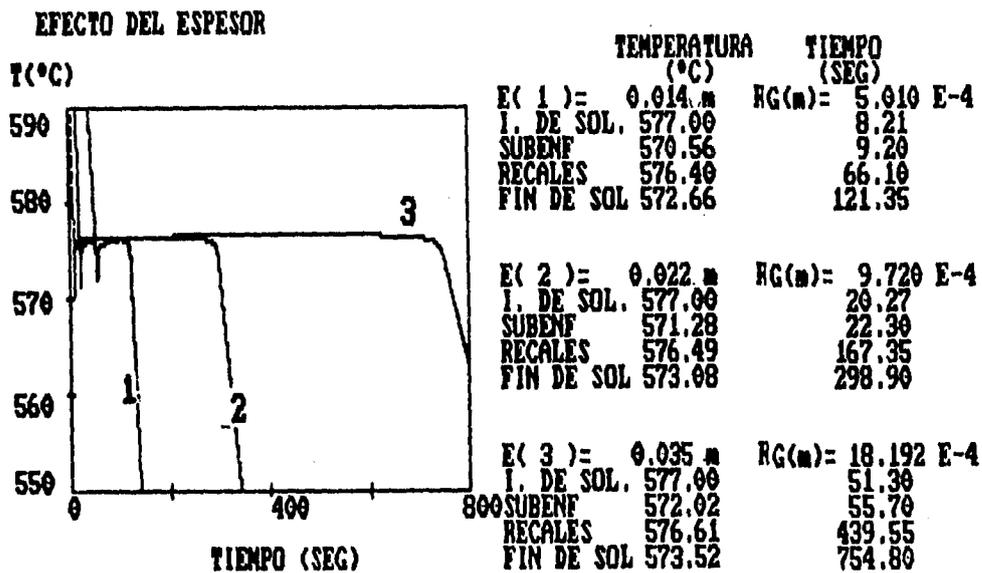


Figura IV.7 Curvas de enfriamiento proporcionadas por el modelo y asociadas a los cilindros de eutéctico Al-Si con 1.4 cm , 2.2 cm y 3.5 cm de diámetro respectivamente colados a una temperatura de 720 oC

En la figura IV.8 se muestran a las curvas de enfriamiento y a los tamaños de grano proporcionados por el modelo para los cilindros de interés y a la temperatura de colada de 670 °C

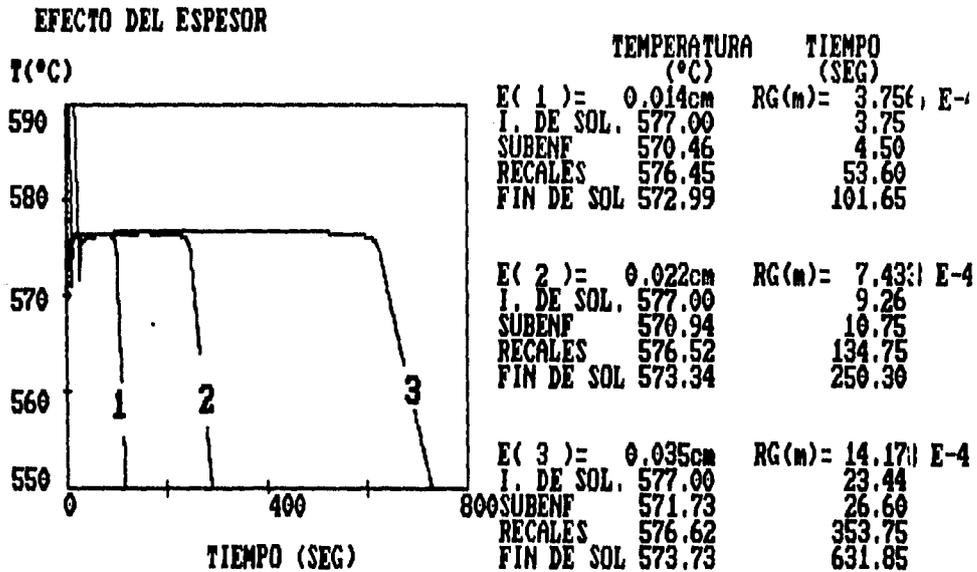


Figura IV.8 Curvas de enfriamiento proporcionadas por el modelo y asociadas a los cilindros de eutéctico Al-Si con 1.4 cm, 2.2 cm y 3.5 cm de diámetro respectivamente colados a una temperatura de 670 °C

Comparando las figuras IV.7 y IV.3, en IV.2 se puede constatar que los resultados arrojados por el modelo, con respecto a las historias térmicas de los cilindros considerados, y al efecto sobre el tamaño de grano en el caso de las muestras de 1.4 cm y 2.2 cm de diámetro presentan una concordancia aceptable con los resultados experimentales para una $T_c = 720 \text{ }^\circ\text{C}$.

Comparando las figuras IV.8 y IV.5 , en IV.4 se observa que si bien existe una concordancia cualitativa en las curvas de enfriamiento, desde el punto de vista microestructural la presencia de la zona columnar en caso de la muestra de 1.4cm de diámetro y las macroestructuras de los dos cilindros restantes contradicen por completo lo predicho por los modelos.

También las predicciones del modelo fallan en el caso de las muestras de 3.6 cm de diámetro, mostradas en las figuras IV.2 y IV.4 en donde no se puede distinguir una diferencia apreciable por efecto de la temperatura de colada , ni una tendencia claramente definida con respecto a los cilindros de diámetro inmediato inferior

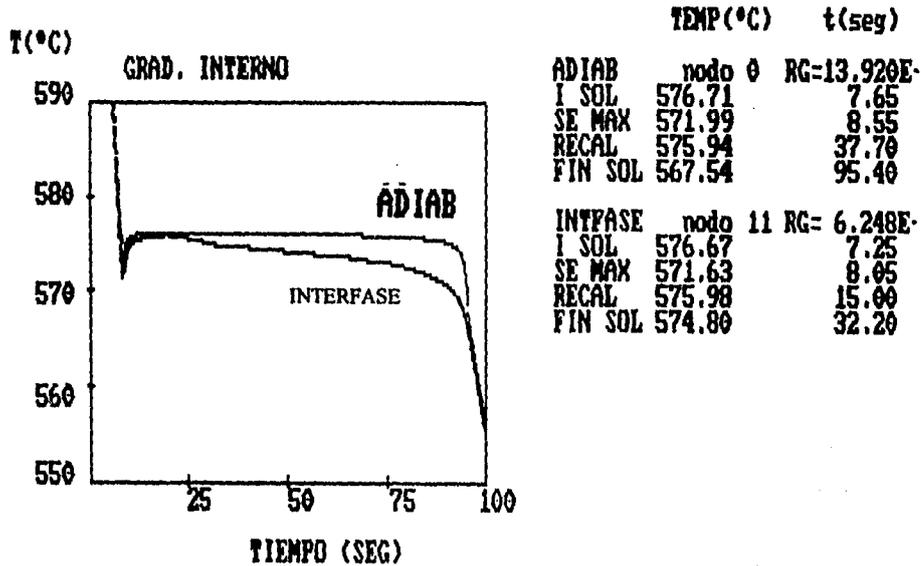


Figura IV.9 Curvas de enfriamiento proporcionadas por el modelo y asociadas al centro y a la interfase molde-metal para el cilindro de eutéctico Al-Si con 2.2 cm de diámetro colado a una temperatura de 670 oC.

En la figura IV.9 se presenta a las curvas de enfriamiento arrojadas por el modelo en el caso del nodo ubicado en la interfase molde-metal y en el centro del cilindro de 2.2 cm de diámetro colado a 670°C. La comparación de esta figura con lo mostrado en la figura IV.6 indica una buena concordancia cualitativa.

IV. 4 DISCUSIÓN DE RESULTADOS.

Si bien , el efecto de refinación de grano asociado a una mayor velocidad de enfriamiento impuesta por un menor diámetro se observa experimentalmente al comparar los cilindros de 1.4cm y 2.2 cm de diámetro en la figura 8 , lo cual indica la existencia de un conjunto de condiciones experimentales en donde los modelos propuestos en este trabajo son aplicables, los resultados obtenidos de la experimentación preliminar realizada ponen en evidencia las limitaciones aplicativas de los modelos propuestos con respecto a la predicción del tamaño de grano bajo un amplio rango de condiciones experimentales.

Esto se debe a que los modelos propuestos sólo consideran a la transferencia de calor y a la cinética de solidificación equiaxial, siendo que en las condiciones experimentales analizadas, los resultados obtenidos indican que la transición columnar-equiaxial y los efectos hidrodinámicos juegan un papel importante en el establecimiento de las características microestructurales del producto solidificado.

Con respecto al papel que desempeña la transición columnar equiaxial, la comparación de las muestras de 1.4 cm de diámetro mostradas en las figs IV.4 y IV.6 sugieren que el efecto refinador de grano que se presenta asociado a un incremento en la velocidad de enfriamiento ,verificado experimentalmente al comparar los cilindros de 1.4cm y 2.2 cm de diámetro en la figura 8 ,tiene lugar en tanto no se sobrepase un valor crítico de subenfriamiento , por encima del cual se desarrollan granos columnares; este límite fué sobrepasado en el caso del cilindro de 1.4cm de diámetro presentado en la figura IV.6, y el

subenfriamiento experimental asociado fué de 9 oC, contra 6oC de la muestra del mismo diámetro colada a 720oC .

La similitud de las macroestructuras que presentan las probetas de 3.5cm de diametro mostradas en las figuras IV.4($T_c = 720\text{ }^\circ\text{C}$) y IV.6 ($T_c=670\text{ }^\circ\text{C}$) puede ser atribuida al efecto del flujo convectivo del metal durante la etapa de enfriamiento del liquido y la solidificación. Es de esperarse que conforme se incrementa el diametro del cilindro es mas intenso el flujo convectivo del metal liquido en la etapas de enfriamiento del liquido y durante la solidificación lo cual puede afectar de manera importante el numero de sitios de nucleación disponibles durante la solidificación, como lo mencionan algunas teorías¹⁰ que tratan de explicar el origen de los sitios de nucleación presentes durante la solidificación como resultado de la interacción del metal líquido en movimiento en contacto con las paredes del molde.

CONCLUSIONES.

Se elaboraron dos modelos matematicos para predecir las curvas de enfriamiento y el tamaño de grano al final de la solidificación asociados a cilindros infinitos de aleacion eutectica Al-Si colados en moldes de arena ,considerando la transferencia de calor acoplada a la cinetica de solidificacion equiaxial .

Dentro de este contexto es posible establecer que una mayor velocidad de enfriamiento provocara un efecto refinador en el tamaño de grano hasta un cierto valor crítico y que es manifestado por el subenfriamiento.

A pesar de las consideraciones anteriores sobre las que se fundamentan estos modelos, resultan erroneos en la prediccion del tamaño de grano bajo un amplio rango de condiciones experimentales, no asi las curvas de enfriamiento cuyas tendencias concuerdan aceptablemente

Esto conduce a sugerir, la consideración de otros mecanismos presentes en la solidificación como es el flujo de fluidos si se quiere tener un modelo más acorde con la realidad.

Los resultados y razonamientos obtenidos de este tipo de modelos se acercan al comportamiento real en tanto no existan otros fenómenos, no considerados en el modelo, que jueguen un papel importante en la determinación de las características microestructurales.

Los modelos propuestos en este trabajo predicen que una mayor velocidad de enfriamiento, asociada con una disminución en la temperatura de colada y una disminución en el diámetro del cilindro provocan una disminución en el tamaño de grano obtenido en la aleación al final de la solidificación.

La evidencia obtenida por la experimentación preliminar realizada sugiere que el efecto de disminución en el tamaño de grano asociado a un incremento en la velocidad de enfriamiento se presenta hasta que la velocidad de enfriamiento alcanza un cierto valor crítico por encima del cual se presenta la transición columnar-equiaxial. También sugiere que conforme se incrementa el diámetro de los cilindros existen otros efectos, que pueden estar relacionados con el flujo convectivo del metal líquido, los cuales desempeñan un papel importante en la determinación del número de sitios de nucleación y por ende sobre el tamaño de grano.

Entre estos extremos existe un conjunto de condiciones experimentales que se adecua a las predicciones y razonamientos que se desprenden de los modelos propuestos en este trabajo.

Es necesario determinar experimentalmente estas condiciones.

BIBLIOGRAFIA.

- 1. Fras E., Kapturkiewicz W., Burbielko A., Lopez H.F. "A New Concept in Thermal Analysis of castings". AFS Transactions vol. 101 , 505-510 (1993).**
- 2. Fras E., Lopez H. F. "A generalized Theory of the chilling Tendency of Cast Iron" AFS Transactions Vol 101 , 357-359. (1993)**
- 3. Apelian D., Sigworth G: K., Whaler K. R. "Assessment of grain refinement and modification of Al -Si Foundry alloys by thermal analysis".AFS Transactions Vol 92, 297-302 , (1984).**
- 4. Fras E., Kapturkiews W., Lopez H. F: "Macro and micromodeling of the solidification Kinetics of castings" AFS Transactions Vol 100 , 583-590. (1992).**
- 5. Oldsfield W. "Chilling mechanism of chromium in cast iron" BCIRA Journal , Vol 9 pag 507-509 (1961)**
- 6. Goetsch D., Dantzing J. A. Modeling Microstructure Development in cast irons Metallurgical and materials Transactions A . 1063- 1070 Vol. 25 (1994).**
- 7. Hurley T.J., Atkinson R.G. "Effects of modification Practica on Aluminium " AFS Transactions Vol. 93 , 291-296 (1985)**
- 8. Hui D., Jingxiang Y., Davis K. G. "Thermal Effects during the solidification of cast iron", AFS Transactions Vol 93, 917-923 (1985)**
- 9. Yeu C. M., Evans W. J., Nowicki R.M., Cole G. S. "Measuring the quality of aluminium casting alloys with microprocessor aided thermal analysis. AFS Transactions Vol 93, 199,204 (1985)**
- 10. Upadahya ,D.K.Banerjee "Heat Transfer solidification kinetics modelling of structural transiction " . A.F.S. Transactions Vol. 96, 699-706 , (1988).**
- 11. D. M. Stefanescu , G. Upadahya "Hent Transfer solidification kinetics modelling of solidification of castings " Metallurgical Transactions A. Vol. 21A, 997-1005, (1990).**

12. H. Fredriksson , I.L. Svensson. "Computer simulation of the structure formed during solidification of cast iron. Ed North Holland, New York, 273-283 (1984).
13. D. M. Stefanescu "Solidification of flake , compacted / vermicular and spheroidal graphite cast iron as revealed by thermal analysis and directional solidification experiments." Idem 3 , 151-162 (1984).
14. K.C. Su , I. Ohnaka "Computer simulation of nodular cast iron". Idem 3 ,181-189.
15. B. Carnahan "Applied Numerical Methods ", (1979)
16. P. Thevoz , J.L. Desbiolles. "Modelling of equiaxed formation in casting" Metallurgical Transactions A. Vol 20A , 311-321, (1989).
17. R.A. Krivaneck , C.E. Mobley "A computer model for the solidification of cast iron chill test" A.F.S. Transactions Vol 92, 311-317,(1984) ,
18. P. Magnin , T.Mason "Growth of irregular eutectics and the Al-Si system" Acta Metallurgica , Vol 39, No 4 , 469-480, (1991).
19. Rappaz M. ,"Modelling of microstructure formation in solidification processes", International Materials Reviews, Vol 34 , No 3 , 1989.
20. Flemings M. "Processing Solidification" McGraw Hill , 7-21,(1974).
21. Geiger G.B. , Piorier D. R. "Transport Phenomena in Metallurgy " Adisson Wesley Pub. Co. ,329-335, (1973).
22. Szekely J. Themelis N. "Process Metallurgy", Jhon Willey Sons , 177- 181, (1971).
23. Frederiksson H. "Interpretation and use of cooling curves", Metals Handbook , T.M.S. International ,Vol 13, 182-185,(1993).
24. Perepezko J. H. "Nucleation Kinetics" Metals Handbook ,T.M.S. International , Vol 13, 101-105 (1993).
25. Magnin P. , Wurtz W. "Solidification of eutectics" Metals Handbook , T.M.S. International ,Vol 13 119-123 (1993)

APÉNDICE A

OBTENCIÓN DE LA EXPRESIÓN QUE DESCRIBE AL FLUJO DE CALOR EN LA INTERCARA MOLDE - METAL.

ANTECEDENTES.

Definición de las propiedades de la función error ²²

La función error erf (x) y la función error complementaria erfc (x) se definen como:

$$\text{erf}[f(x)] = \frac{2}{\sqrt{\pi}} \int_0^{f(x)} e^{-n^2} dn$$

$$\text{erfc}[f(x)] = 1 - \text{erf}[f(x)] = \frac{2}{\sqrt{\pi}} \int_{f(x)}^{\infty} e^{-n^2} dn$$

La función error y la función error complementaria tienen las siguientes propiedades:

$$\text{erf}(0) = 0$$

$$\text{erfc}(0) = 1$$

$$\text{erf}(\infty) = 1$$

$$\text{erfc}(\infty) = 0$$

$$\text{erf}[-f(x)] = -\text{erf}[f(x)]$$

$$\text{erfc}[-f(x)] = 1 + \text{erf}[f(x)]$$

Teorema de Leibnitz.

La derivada de una integral definida en las cuales los limites inferior y superior son representados por funciones equivale a la derivada del limite superior multiplicado por el argumento de la integral evaluada en el limite superior menos la derivada del limite inferior multiplicada por el argumento de la integral evaluada en el limite inferior.

Es decir:

$$\frac{\partial}{\partial x} \int_{f_1(x)}^{f_2(x)} e^{-n^2} dn = \left\langle \frac{d}{dx} f_2(x) \right\rangle e^{-f_2^2(x)} - \left\langle \frac{d}{dx} f_1(x) \right\rangle e^{-f_1^2(x)}$$

Desarrollo matemático:

Partimos de la expresión:

$$\frac{T - T_m}{T_o - T_m} = \text{erf} \left\langle \frac{x}{2\sqrt{\alpha t}} \right\rangle \dots\dots\dots (A.1)$$

De la cual la temperatura es despejada obteniendo:

$$T = (T_o - T_m) \text{erf} \left\langle \frac{x}{2\sqrt{\alpha t}} \right\rangle + T_m \dots\dots\dots (A.2)$$

Aplicando la definición de flux de calor

$$Q_x = -KA \frac{dT}{dx} \dots\dots\dots (A.3)$$

Por lo que es necesario encontrar la derivada de la temperatura a partir de la expresión (I.2) y aplicando la definición de la función error se tiene.

$$\frac{dT}{dx} = (T_0 - T_m) \frac{d}{dx} \frac{2}{\sqrt{\pi}} \int_0^{\frac{x}{2\sqrt{\alpha t}}} -e^{-n^2} dn \dots\dots\dots (A.4)$$

Aplicando el teorema de Leibnitz tendremos:

$$\frac{dT}{dx} = (T_0 - T_m) \frac{1}{\sqrt{\pi \alpha t}} \exp\left(\frac{-x^2}{4 \alpha t}\right) \dots\dots\dots (A.5)$$

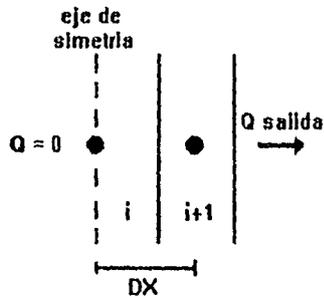
Sustituyendo la ecuación (I.5) en la ecuación (I.3) y considerando que la intercara molde - metal se encuentra en el origen (x=0) y sustituyendo a la difusividad de la arena tendremos:

$$\frac{dQ}{dt} = (T - T_0) \sqrt{\frac{(K \rho C_p)_{arena}}{\pi t}} \dots\dots\dots (A.6)$$

APÉNDICE B.

DEDUCCIÓN DE LAS ECUACIONES NODALES.

Nodo tipo 1 (eje adiabático)



El principio de conservación de la energía es representado como:

Flujo de calor que entra al volumen de control	- Flujo de calor que sale del volumen de control	= Rapidez del cambio de entalpía
--	--	--

El cual es expresado matemáticamente como:

$$-K_m A_t \frac{\partial T}{\partial r} = \rho_m V C p_m \frac{\partial T}{\partial t}$$

Donde A_t es el área transversal en la cual se realiza el transporte de energía y que para un cilindro es $2\pi(R_i - \frac{\Delta r}{2})$ en el caso de que sea el área interna del nodo de interés y

$2\pi(R_i + \frac{\Delta r}{2})$ para el área externa.

Asimismo el volumen de un cilindro es definido para este nodo en particular como:

Asimismo el volumen de un cilindro es definido para este nodo en particular como::

$$V = \pi \left(\frac{\Delta r}{2} \right)^2$$

Escribiendo la anterior expresión en términos de diferencias finitas y utilizando la convención de que el flujo de calor va de izquierda a derecha se tiene para el nodo $i=0$:

$$(0) - \left(-K_m 2\pi \frac{\Delta r}{2} (1) \frac{(T'_{i+1} - T'_i)}{\Delta r} \right) = \rho_m C p_m \left(2\pi \left(\frac{\Delta r}{2} \right)^2 \right) \frac{(T'_i - T_i)}{\Delta t}$$

Nota : El flujo que entra al volumen de control es cero debido a que se tienen las mismas condiciones para las intercaras molde- medio ambiente y debido a que nos encontramos en el centro del sistema compuesto molde- metal.

Dividiendo a toda la ecuación entre $\frac{2\pi \Delta t}{\rho_m C p_m}$ y desarrollando se tiene:

$$\frac{4K_m \Delta t}{\rho_m C p_m \Delta r^2} (T'_{i+1} - T'_i) = (T'_i - T_i)$$

Al utilizar las definiciones para la difusividad térmica y para el Fom se llega a la siguiente expresión:

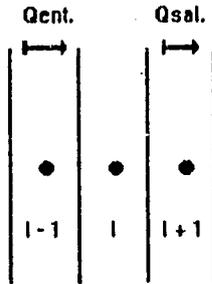
$$T'_i - 4Fo_m (T'_{i+1} - T'_i) = T_i$$

Agrupando términos semejantes y dividiendo entre $4Fo_m$ llegamos a la expresión final para este nodo.

$$-T'_{i+1} + \left(1 + \frac{1}{4Fo_m} \right) T'_i = \frac{T_i}{4Fo_m}$$

Familia nodal "M" (seno del metal).

Aplicaremos un balance de energía alrededor de dicho nodo.



$$-k_m 2\pi \left\langle R_i - \frac{\Delta r}{2} \right\rangle \frac{(T'_i - T'_{i-1})}{\Delta r} - (-K_m 2\pi \left\langle R_i + \frac{\Delta r}{2} \right\rangle \frac{(T'_{i+1} - T'_i)}{\Delta r}) = \rho_m C p_m (2\pi R_i \Delta r) \frac{(T'_i - T_i)}{\Delta t}$$

Dividiendo entre $\rho_m C p$ y sabiendo que la difusividad térmica se define como $\alpha_m = \frac{K_m}{\rho_m C p_m}$

Sustituyendo:

$$\frac{\alpha_m}{\Delta r^2} \left\langle \frac{R_i - \frac{\Delta r}{2}}{R_i} \right\rangle (T'_i - T'_{i-1}) + \frac{\alpha_m}{\Delta r^2} \left\langle \frac{R_i + \frac{\Delta r}{2}}{R_i} \right\rangle (T'_{i+1} - T'_i) = \frac{(T'_i - T_i)}{\Delta t}$$

Dado que $Fo_m = \frac{\alpha_m \Delta t}{\Delta r^2}$ y dado que $R_i = i \Delta r$ tendremos que la ecuación se reduce

a:

$$-Fo_m \left\langle 1 - \frac{1}{2i} \right\rangle (T'_i - T'_{i-1}) + Fo_m \left\langle 1 + \frac{1}{2i} \right\rangle (T'_{i+1} - T'_i) = T'_i - T_i$$

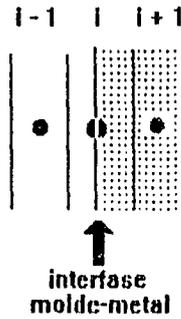
Agrupando términos comunes :

$$-Fo_m \left\langle 1 - \frac{1}{2i} \right\rangle T'_{i-1} + (1 + 2 Fo_m) T'_i - Fo_m \left\langle 1 + \frac{1}{2i} \right\rangle T'_{i+1} = T_i$$

Dividiendo entre Fo_m tendremos:

$$-\left\langle 1 - \frac{1}{2i} \right\rangle T'_{i-1} + \left\langle 2 + \frac{1}{Fo_m} \right\rangle T'_i - \left\langle 1 + \frac{1}{2i} \right\rangle T'_{i+1} = \frac{T_i}{Fo_m}$$

Nodo tipo 2 (interfase molde-metal).



La ecuación resultante al realizar el balance de energía alrededor de este nodo es

$$-2\pi \left\langle R_1 - \frac{\Delta r}{2} \right\rangle K_m \frac{(T'_i - T'_{i-1})}{\Delta r} - \left\langle 2\pi \left\langle R_1 + \frac{\Delta r}{2} \right\rangle K_s \right\rangle \frac{(T'_{i+1} - T'_i)}{\Delta r} - (2\pi R_1 \Delta r) \frac{1}{2} (\rho_m C_{p_m} + \rho_s C_{p_s}) \frac{(T'_i - T_i)}{\Delta t}$$

Multiplicando por $\frac{K_m K_s}{K_m K_s}$ y dividiendo a toda la ecuación entre $R_1 \Delta r$ la ecuación se

reduce a :

$$-2 \left\langle \frac{R_1 - \frac{\Delta r}{2}}{R_1} \right\rangle K_m \frac{(T'_i - T'_{i-1})}{\Delta r^2} + 2 \left\langle \frac{R_1 + \frac{\Delta r}{2}}{R_1} \right\rangle K_s \frac{(T'_{i+1} - T'_i)}{\Delta r^2} = \left\langle \frac{K_s \alpha_m + K_m \alpha_s}{\alpha_s \alpha_m} \right\rangle \left\langle \frac{T'_i - T_i}{\Delta t} \right\rangle$$

Hemos definido a la coordenada característica R_i como $i \Delta r$ y a la constante PAR_i

igual a $\frac{\alpha_s}{\alpha_m K_m \alpha_s K_s}$ los cuales al sustituirlos en la ecuación anterior se obtiene:

$$-2 \left\langle 1 - \frac{1}{2i} \right\rangle PAR_i \frac{\alpha_m \Delta t}{\Delta r^2} K_m (T'_i - T'_{i-1}) + 2 \left\langle 1 + \frac{1}{2i} \right\rangle PAR_i \frac{\alpha_m \Delta t}{\Delta r^2} K_s (T'_{i+1} - T'_i) = T'_i - T_i$$

Utilizando la definición del número de Fourier $Fo_m = \frac{\alpha_m \Delta t}{\Delta r^2}$ la ecuación se reduce

a:

$$-2 \left\langle 1 - \frac{l}{2i} \right\rangle PAR / Fo_m K_m (T'_i - T'_{i-1}) + 2 \left\langle 1 + \frac{l}{2i} \right\rangle PAR / Fo_m K_a (T'_{i+1} - T'_i) = T'_i - T_i$$

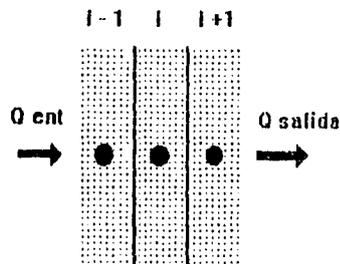
Definiremos a la constante $PAR2 = 2 PAR1 Fo_m$ la cual al introducirla en la ecuación da lugar a la expresión.

$$- \left\langle PAR2 K_m \left(1 - \frac{l}{2i} \right) \right\rangle T'_{i-1} + \left\langle 1 + PAR2 K_m \left(1 + \frac{l}{2i} \right) + PAR2 K_a \left(1 - \frac{l}{2i} \right) \right\rangle T'_i - \left\langle PAR2 K_a \left(1 - \frac{l}{2i} \right) \right\rangle T'_{i+1} = T_i$$

Dividiendo entre PAR2

$$- \left\langle 1 - \frac{l}{2i} \right\rangle K_m T'_{i-1} + \left\langle 1 + K_m \left(1 - \frac{l}{2i} \right) + K_a \left(1 + \frac{l}{2i} \right) \right\rangle T'_i - \left\langle 1 + \frac{l}{2i} \right\rangle K_a T'_{i+1} = \frac{T_i}{PAR2}$$

Familia nodal "A" (seno de la arena)



Al aplicar la ecuación de conservación de la energía en dicho nodo en diferencias finitas se tiene:

$$-k_a 2\pi \left\langle R_i - \frac{\Delta r}{2} \right\rangle \frac{(T'_i - T'_{i-1})}{\Delta r} - (-K_a 2\pi \left\langle R_i + \frac{\Delta r}{2} \right\rangle \frac{(T'_{i+1} - T'_i)}{\Delta r}) = \rho_a C p_a (2\pi R_i \Delta r) \frac{(T'_i - T_i)}{\Delta t}$$

Dividiendo entre $\rho_m C p$ y sabiendo que la difusividad térmica se define como $\alpha_a = \frac{K_a}{\rho_a C p_a}$

Sustituyendo:

$$-\frac{\alpha_a}{\Delta r^2} \left\langle \frac{R_i - \frac{\Delta r}{2}}{R_i} \right\rangle (T'_i - T'_{i-1}) + \frac{\alpha_a}{\Delta r^2} \left\langle \frac{R_i + \frac{\Delta r}{2}}{R_i} \right\rangle (T'_{i+1} - T'_i) = \frac{(T'_i - T_i)}{\Delta t}$$

Dado que $Fo_a = \frac{\alpha_a \Delta t}{\Delta r^2}$ y dado que $R_i = i \Delta r$ tendremos que la ecuación se reduce

a:

$$-Fo_a \left\langle 1 - \frac{1}{2i} \right\rangle (T'_i - T'_{i-1}) + Fo_a \left\langle 1 + \frac{1}{2i} \right\rangle (T'_{i+1} - T'_i) = T'_i - T_i$$

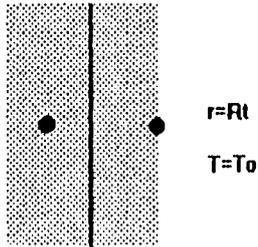
Agrupando términos comunes :

$$-Fo_a \left\langle 1 - \frac{1}{2i} \right\rangle T'_{i-1} + (1 + 2Fo_a) T'_i - Fo_a \left\langle 1 + \frac{1}{2i} \right\rangle T'_{i+1} = T_i$$

Dividiendo entre Fo_m tendremos:

$$-\left\langle 1 - \frac{1}{2i} \right\rangle T'_{i-1} + \left\langle 2 + \frac{1}{Fo_m} \right\rangle T'_i - \left\langle 1 + \frac{1}{2i} \right\rangle T'_{i+1} = \frac{T_i}{Fo_m}$$

Nodo tipo 3 (convectivo)



Realizando el balance de energía alrededor de este nodo se obtiene.

$$-2K_s \left(R_i - \frac{\Delta r}{2} \right) \left(\frac{T'_i - T'_{i-1}}{\Delta r} \right) - \left(-2 \rho_s C_{p,s} \left(\pi R_i \Delta r \right) \left(\frac{T'_i - T_i}{\Delta t} \right) \right)$$

Multiplicando a toda la ecuación por $\left(\frac{\rho_s C_{p,s} \Delta t}{\Delta r} \right)$ y aplicando la definición de la

difusividad la ecuación se reduce a:

$$\left(\frac{2\alpha_s \Delta t}{\Delta r^2} \right) \left(\frac{R_i - \frac{\Delta r}{2}}{R_i} \right) (T'_i - T'_{i-1}) + \left(\frac{2h_\infty \Delta t}{\rho_s C_{p,s} \Delta r} \right) (T_\infty - T'_i) = (T'_i - T_i)$$

Aplicando las siguientes definiciones para el Fo y el Bi así como la de Ri

$$Fo_s = \frac{\alpha_s \Delta t}{\Delta x^2} \quad Bi = \frac{h_\infty \Delta x}{K}$$

Tendremos que la ecuación obtenida es:

$$-2Fo_s \left(1 - \frac{1}{2i} \right) (T'_i - T'_{i-1}) + 2Fo_s Bi (T_\infty - T'_i) = T'_i - T_i$$

Factorizando.

$$-2Fo_a \left\langle 1 - \frac{1}{2i} \right\rangle T'_{i-1} + \left(1 - \frac{1}{2i} + 2Fo_a + 2Fo_a Bi \right) T'_i = 2Fo_a Bi T_\infty + T_i$$

Dividiendo entre $2Fo_a$ la ecuación final para el nodo convectivo es:

$$-\left\langle 1 - \frac{1}{2i} \right\rangle T'_{i-1} + \left\langle Bi + 1 + \frac{1}{2Fo_a} - \frac{1}{2i} \right\rangle T'_i = \frac{T_i}{2Fo_a} + Bi T_\infty$$

APÉNDICE C

PROPIEDADES TERMOFISICAS

Conductividad Térmica

Valor	Material	Unidades	Símbolo
100	Al-Si _{eut}	W/m °C	K _s
200	Al-Si _{eut}	W/m °C	K _r
0.06	Arena	W/m °C	K _a

Capacidad Calorífica

Valor	Material	Unidades	Símbolo
1000	Al-Si _{eut}	J/Kg °C	C _{ps}
960	Al-Si _{eut}	J/Kg °C	C _{pr}
1500	Arena	J/Kg °C	C _{pa}

Densidad

Valor	Material	Unidades	Símbolo
2450	Al-Si _{eut}	Kg / m ³	P _s
2600	Al-Si _{eut}	Kg / m ³	P _r
1000	Arena	Kg / m ³	P _a

APÉNDICE D

PARAMETROS TERMICOS Y CINETICOS

Propiedad o cte	Simbolo	Unidades	Valor
Calor de fusión	Hf	J/Kg °C	396000
Coficiente de transferencia de calor molde-madio ambiente	h	W/m ² °C	1.06
Cte de crecimiento	μ	m/s °C ²	1.068E-5
Termino exponencial de la ley de nucleación	k	---	12.9586
Termino preexponencial de la ley de nucleacion	ψ	m ³ /°K ²	0.33564