



**UNIVERSIDAD NACIONAL AUTÓNOMA  
DE MÉXICO**

---

---

**FACULTAD DE QUÍMICA**

“EVALUACIÓN POR MODELADO MATEMÁTICO DE LOS  
FACTORES QUE FAVORECEN LA UNIDIRECCIONALIDAD EN  
LA SOLIDIFICACIÓN DE LA ALEACIÓN Al-Cu4.5%”

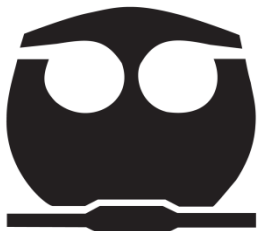
**T E S I S**

QUE PARA OBTENER EL TÍTULO DE

**INGENIERO QUÍMICO METALÚRGICO**

PRESENTA

**ENRIQUE RODRÍGUEZ BENÍTEZ**



MÉXICO, D.F.

AÑO 2013



Universidad Nacional  
Autónoma de México

Dirección General de Bibliotecas de la UNAM

**Biblioteca Central**



**UNAM – Dirección General de Bibliotecas**  
**Tesis Digitales**  
**Restricciones de uso**

**DERECHOS RESERVADOS ©**  
**PROHIBIDA SU REPRODUCCIÓN TOTAL O PARCIAL**

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

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

## **JURADO ASIGNADO:**

**PRESIDENTE: Profesor: JOSÉ ANTONIO BARRERA GODÍNEZ**

**VOCAL: Profesor: ALBERTO INGALLS CRUZ**

**SECRETARIO: Profesor: ADRIÁN MANUEL AMARO VILLEDA**

**1<sup>er</sup>. SUPLENTE: Profesor: AGUSTÍN GERARDO RUIZ TAMAYO**

**2<sup>do</sup>. SUPLENTE: Profesor: GERARDO SANJUAN SANJUAN**

## **SITIO DONDE SE DESARROLLÓ EL TEMA:**

DEPARTAMENTO DE INGENIERÍA QUÍMICA METALÚRGICA, FACULTAD DE QUÍMICA, EDIFICIO D, CIUDAD UNIVERSITARIA, UNAM

## **ASESOR DEL TEMA:**

**M. EN C. ALBERTO INGALLS CRUZ**

\_\_\_\_\_

## **SUSTENTANTE (S):**

**ENRIQUE RODRÍGUEZ BENÍTEZ**

\_\_\_\_\_

# INDICE

## CAPÍTULO 1

<b>INTRODUCCIÓN</b>	<b>1</b>
1.1 Introducción	1
1.2 Objetivo	2

## CAPÍTULO 2

<b>ANTECEDENTES</b>	<b>3</b>
2.1 Solidificación de aleaciones	3
2.1.1 Solidificación al equilibrio	5
2.1.2 Solidificación fuera del equilibrio	7
2.1.3 Solidificación fuera del equilibrio con capa difusiva enfrente de la intercara sólido- líquido	9
2.2 Estabilidad de la intercara sólido-líquido	12
2.3 Solidificación celular	17
2.4 Solidificación dendrítica	18
2.5 Modelado Matemático	21

## CAPÍTULO 3

<b>MODELO MATEMÁTICO</b>	<b>24</b>
3.1 Descripción del sistema	24
3.2 Simplificaciones	24
3.3 Método de solución	29
3.4 Algoritmo de solución	34
3.5 Verificación del modelo	35
3.6 Validación del modelo	39
3.7 Pruebas de simulación preliminares	42

<b>CAPÍTULO 4</b>	
<b>SIMULACIÓN</b>	<b>44</b>
<b>CAPÍTULO 5</b>	
<b>RESULTADOS Y DISCUSIÓN</b>	<b>47</b>
<b>CAPÍTULO 6</b>	
<b>CONCLUSIONES</b>	<b>61</b>
<b>BIBLIOGRAFÍA</b>	<b>62</b>
<b>APÉNDICES</b>	<b>64</b>
A.1 Desarrollo del Balance de energía nodal	64
A.2 Propiedades de la aleación Al-Cu4.5%	67
A.3 Calculo del coeficiente $h_{C2}$	68
A.4 Número de Biot	71

# CAPÍTULO 1 INTRODUCCIÓN

## ***1.1 Introducción.***

De todas las técnicas de procesamiento que se usan en la manufactura de los materiales metálicos, la solidificación es la más importante. Todos los materiales metálicos, son líquidos o están fundidos en algún momento durante su procesamiento.

Se entiende por solidificación al cambio de fase de estado líquido a sólido. La forma en cómo se lleve a cabo este cambio, tiene una influencia significativa en las propiedades finales del material. Muchos de los defectos originados durante la solidificación tienden a permanecer, incluso en etapas posteriores de procesamiento; como podría ser el conformado mecánico o algún tratamiento térmico. A pesar de que la solidificación es un proceso que se conoce desde la antigüedad (aproximadamente 5000 años a.C.), los mayores avances en el conocimiento sobre este tema, se han obtenido a partir del siglo pasado. Muchos han sido las aportaciones que se han hecho desde entonces, todas teniendo como fin la mejora o la predicción de las propiedades finales de la pieza metálica solidificada. Uno de los primeros puntos que se han tratado ha sido la manera en que ocurre la transferencia de calor durante todo el proceso. Para poder tener un mayor control sobre esta parte crítica de la solidificación, Bridgman, [1,2] propuso un dispositivo que lleva su nombre y que consiste en un crisol que es calentado en la parte superior y enfriado por la parte inferior, con lo anterior se promueve un gradiente de temperatura constante, y una velocidad uniforme, bajo estas condiciones se pueden obtener microestructuras de gran uniformidad a lo largo de toda la pieza. A este método se le conoce como solidificación direccional y es el tema a tratar en el presente trabajo.

## **1.2 Objetivo.**

Desarrollar un modelo matemático (fenomenológico) para el diseño, simulación y evaluación de los parámetros de la solidificación unidireccional de la aleación Al-Cu4.5%.

## CAPÍTULO 2 ANTECEDENTES

### **2.1 Solidificación de aleaciones.**

El proceso de solidificación, en el cual un metal líquido se enfría en un molde hasta cambiar su estado a sólido, desempeña un papel muy importante en las propiedades finales de cualquier aleación vaciada. Incluso cuando el objeto final se obtiene por medio del conformado mecánico de algún lingote, la estructura que obtiene el lingote durante la solidificación a menudo influye en las propiedades del objeto final.

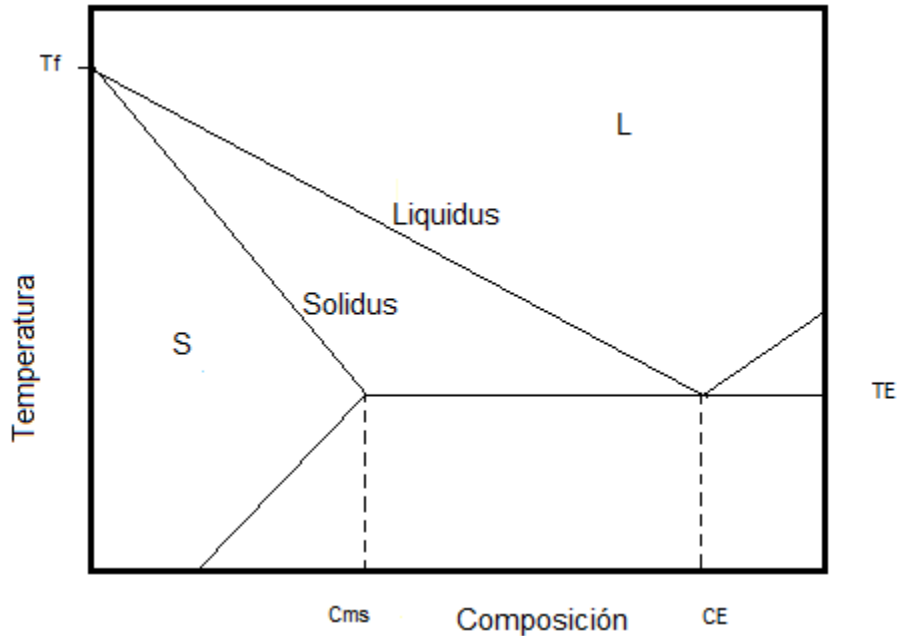
Lo anterior debe su origen principalmente a los siguientes fenómenos:

- La composición inicial, la cual es generalmente uniforme en el líquido, tiende a ser no uniforme al término del cambio de fase.
- Diferentes condiciones de solidificación dan origen a la obtención de diferentes microestructuras en el sólido.
- Algunos defectos, como lo son la porosidad y la contracción, dependen de la manera en la cual la aleación solidifica dentro del molde.

Los dos factores importantes que controlan la microestructura que se obtiene después de la solidificación son la composición de la aleación y las condiciones de transferencia de calor, [3].

Todas las aleaciones de uso ingenieril tienen más de un elemento aleante, incluso algunas de ellas pueden tener hasta más de 10 elementos, sin embargo, su comportamiento general al momento de solidificar puede ser descrito de una manera razonable con las teorías que se ha desarrollado para aleaciones binarias.





**Figura 2.1.** Parte de un diagrama de fase binario simplificado donde se muestran la línea liquidus, solidus, temperatura de fusión del metal base  $T_f$ , temperatura eutéctica  $T_E$ , composición de máxima solubilidad  $C_{ms}$  y composición eutéctica  $CE$ .

Un metal puro tiene una temperatura de fusión específica mientras que una aleación solidifica dentro de un rango de temperaturas. Este rango se representa generalmente con la ayuda de un diagrama de fases como el que se muestra en la figura 2.1.

La línea de liquidus representa la temperatura a la cual la aleación en estado líquido empieza a solidificar durante el enfriamiento, si la solidificación ocurre muy cercana a condiciones de equilibrio el proceso termina cuando la temperatura de solidus se alcanza, pero bajo condiciones fuera del equilibrio la solidificación concluye por debajo de esta línea.

La relación de las composiciones de sólido y líquido a una temperatura fija, se le conoce como coeficiente de distribución de soluto  $k$ , ecuación 2.1. Para soluciones muy diluidas las líneas de liquidus y solidus se pueden considerar líneas rectas en cuyo caso  $k$  es constante y no depende de la temperatura. La figura 2.1 muestra un diagrama en el cual  $k < 1$ .

$$k = \frac{C_S^*}{C_L^*} \quad (2.1)$$

Los enfoques que se han empleado para cuantificar el proceso de solidificación tienen como punto de partida ciertas suposiciones generales como:

- Se alcanza el equilibrio termodinámico local en la intercara solido-liquido.
- La intercara sólido-líquido es plana.
- La solidificación es unidireccional

### **2.1.1 Solidificación al equilibrio.**

Este tipo de solidificación corresponde a un enfriamiento del líquido hasta el sólido en equilibrio. La difusión de soluto en el sólido y en el líquido es total. Por lo tanto, las fases que se generan durante la solidificación se asocian plenamente en el diagrama de fases.

De acuerdo con lo anterior si se parte de una aleación de composición  $C_0$ , cuya solidificación comienza a una  $T_1$ , el primer sólido que se forma tiene una composición de  $kC_0$ . Conforme la temperatura sigue disminuyendo la cantidad de sólido formado sigue aumentando y su composición tiende a acercarse a  $C_0$ , mientras que la composición del líquido remanente tiende al valor de  $C_0/k$ , ver la fig. 2.2. Como se puede ver existe una redistribución de soluto muy significativa durante todo el proceso y el material solo es homogéneo antes y después de solidificar. Si se deseara conocer la cantidad de fracción solidificada dentro de la zona delimitada por las líneas solidus y liquidus, solo es necesario aplicar la regla de la palanca, ecuación 2.2 y fig. 2.2, [4].

$$\begin{aligned} \text{Frac. liq.} &= \frac{\text{Brazo opuesto a la línea liquidus}}{\text{Largo total}} = \frac{B - A}{C - A} \\ \text{Frac. sol.} &= \frac{\text{Brazo opuesto a la línea solidus}}{\text{Largo total}} = \frac{C - B}{C - A} \end{aligned} \quad (2.2)$$

Si se hace una gráfica de la composición de la aleación con respecto a la posición, para el caso de solidificación al equilibrio se obtendrían perfiles de concentración como los mostrados en la fig. 2.3. La composición dentro del líquido y del sólido son constantes a lo largo de la pieza aunque no son iguales al valor de  $C_0$  además varían con respecto a la fracción solidificada.

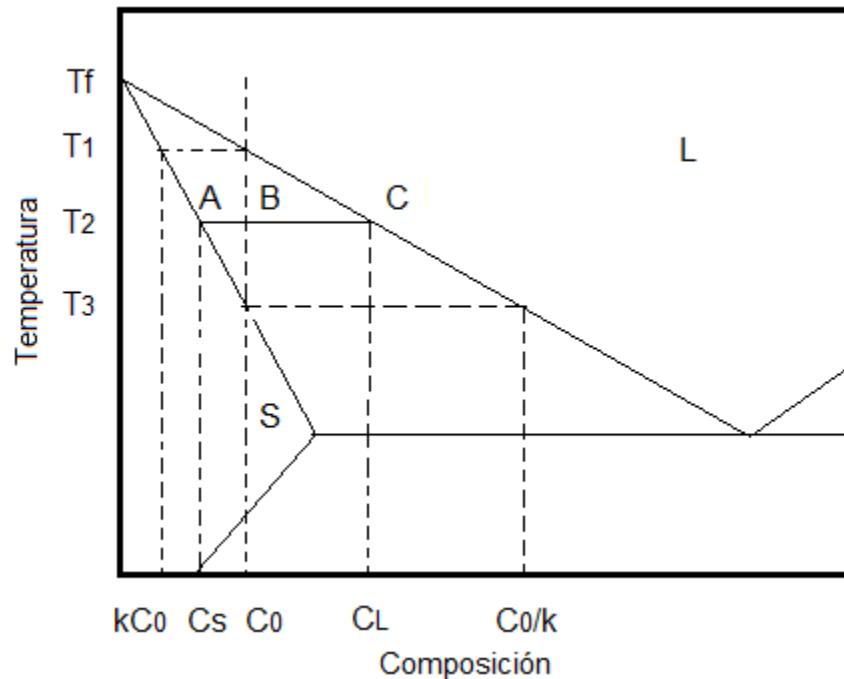
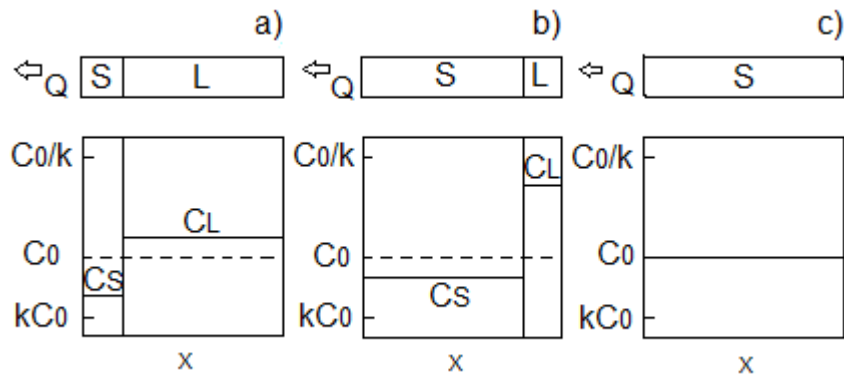


Figura 2.2. Proceso de solidificación de una aleación con composición  $C_0$ . A  $T_1$  el primer sólido tiene una composición igual a  $kC_0$ . A la  $T_2$  se puede calcular la cantidad de sólido formado con la regla de la palanca. Poco antes de solidificar por completo la composición del líquido alcanza un valor de  $C_0/k$ . Al finalizar la solidificación, la aleación tiene el valor de  $C_0$ .

En la fig. 2.3a se observan los perfiles con una fracción solidificada pequeña, el valor de  $C_s$  es menor a  $C_0$  y el valor de  $C_L$  es mayor a  $C_0$ . Con una mayor fracción sólida el valor de  $C_s$  se acerca más a  $C_0$  y la  $C_L$  sigue aumentando, esto se debe a que el líquido tiene mayor solubilidad que el sólido, fig.2.3b. De esta forma todo el soluto que el sólido rechaza termina enriqueciendo al líquido. Al finalizar la solidificación se tiene una concentración constante a lo largo de la pieza solidificada, fig. 2.3c.



**Figura 2.3.** Perfiles de concentración a lo largo de una pieza solidificada al equilibrio. El calor es extraído por la parte izquierda y la intercara sólido-líquido avanza hacia la derecha. a) Con una fracción sólida baja. b) Con una fracción sólida elevada y c) Al final de la solidificación.

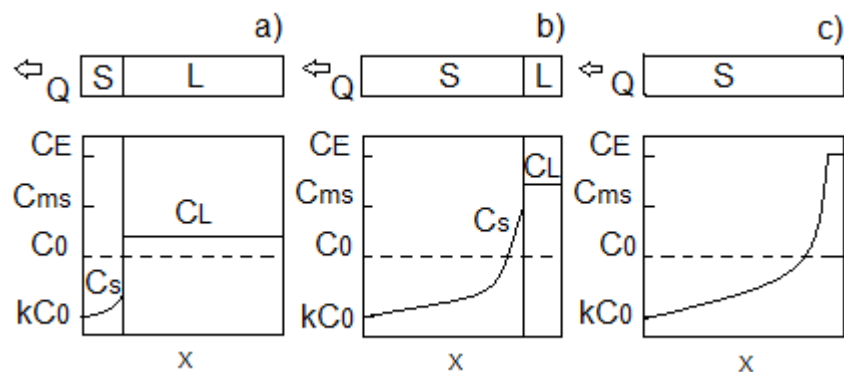
### 2.1.2 Solidificación fuera del equilibrio.

En la actualidad la mayoría de los procesos de manufactura que involucran a la solidificación, se llevan a cabo en cuestión de minutos u horas. Esto tiene como consecuencia que la distribución del soluto en el sólido generalmente sea diferente a la que tenía el líquido antes de solidificar. A esta redistribución de soluto se le conoce como segregación. Existen dos clases de segregación, la macrosegregación y la microsegregación. La primera ocurre a distancias grandes, como por ejemplo entre el centro y la superficie de una pieza fundida. La microsegregación se presenta entre los brazos dendríticos.

El modelo de solidificación fuera del equilibrio o normal toma en consideración a la macrosegregación. Para este modelo hay que suponer lo siguiente:

- Composición química uniforme en el líquido.
- La difusión en el sólido es insignificante.
- La densidad del metal líquido y sólido es la misma.
- Equilibrio termodinámico local en la intercara sólido-líquido.

Si como antes, se parte de una aleación de composición  $C_0$ , el primer sólido que se forma a la  $T_1$  tendrá una composición de  $kC_0$ , este valor es menor que  $C_0$ . El valor de  $C_L$  es mayor a  $C_0$ . La siguiente capa de material que solidifica no tiene tiempo suficiente para difundir el soluto en el sólido y por lo tanto aumenta su concentración fuera del equilibrio. A medida que progresa la solidificación, el líquido se enriquece con soluto, de manera que puede llegar a alcanzar la composición eutéctica, y si éste ocurre, la solidificación tenderá a finalizar a una temperatura muy próxima a la eutéctica y con una estructura característica de este tipo de reacciones, fig.2.4. Una vez que la solidificación se ha completado, la composición media del sólido debe coincidir con la composición inicial  $C_0$ .



**Figura 2.4. Perfiles de concentración a lo largo de una pieza solidificada fuera del equilibrio. a) Con una fracción sólida baja. b) Con una fracción sólida elevada y c) Al final de la solidificación. Al principio de la solidificación hay una escasez de soluto mientras que al final hay un exceso, este fenómeno es conocido como macrosegregación.**

Para conocer el perfil de concentraciones  $C_S$  a lo largo de todo el material, se tiene que igualar la cantidad de soluto expulsada hacia el líquido cuando se forma una pequeña cantidad de sólido, con el aumento de la concentración de soluto en el líquido, [5]. Despreciando la diferencia de volumen específico de ambas fases, se puede escribir lo siguiente:

$$(C_L^* - C_S^*)df_s = (1 - f_s)dC_L \quad (2.3)$$

Donde  $f_s$  es la fracción de volumen solidificado. El valor de  $C_S^*$  se pone en términos de  $C_L^*$  con ayuda de la ecuación 2.1, posteriormente se separan variables y se integra la ecuación 2.3 con los límites  $C_0$  cuando  $f_s=0$  y  $C_L$  cuando  $f_s=f_s$ . El resultado son las ecuaciones 2.4 y 2.5, [2]. A estas ecuaciones se les conoce con el nombre de ecuaciones de Scheil-Gulliver.

$$C_L^* = C_0(1 - f_s)^{k-1} \quad (2.4)$$

$$C_S^* = kC_0(1 - f_s)^{k-1} \quad (2.5)$$

### ***2.1.3 Solidificación fuera del equilibrio con capa difusiva enfrente de la intercara sólido-líquido.***

El fenómeno de convección natural dentro de sistemas metálicos que solidifican es difícil de eliminar debido a las altas densidades de los metales y de su baja viscosidad en estado líquido. Por lo tanto, se esperaría que la convección favoreciera la uniformidad de la distribución de soluto dentro de la fracción líquida, sin embargo esto solamente ocurre en el seno del fluido. Cuando un fluido se desplaza sobre una superficie sólida, su velocidad es cero justo en la superficie del sólido. Por tal motivo se forma una capa límite enriquecida con soluto y donde el transporte es únicamente difusivo, fig. 2.5.

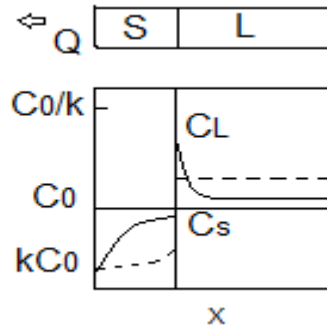


Figura 2.5. Comparación de los perfiles de concentración dentro del transitorio inicial y el modelo de Scheil-Gulliver (líneas punteadas). La concentración del líquido disminuye de un valor máximo en la intercara, hasta el valor de  $C_0$ . La capa límite es donde se presenta este gradiente de concentraciones.

Al igual que en el ejemplo de solidificación fuera del equilibrio, el primer sólido que se forma tiene un valor igual a  $kC_0$  y el primer líquido tiene un valor de  $C_0$ . Una vez más se considera que se alcanza el equilibrio local en la intercara y solamente ahí es válido utilizar la ecuación 2.1. La acumulación de soluto en la capa límite provoca que  $C_L^*$  en la intercara aumente y por lo tanto  $C_S^*$  en la intercara también sufre un aumento. La composición del sólido aumenta mucho más rápido que para el caso en que no hay acumulación, fig. 2.5.

A esta etapa en que la concentración del sólido aumenta de  $kC_0$  hasta un valor igual a  $C_0$  y en donde la concentración del líquido aumenta de  $C_0$  hasta  $C_0/k$ , se le conoce como transitorio inicial. Durante esta etapa los perfiles de concentración con respecto a la distancia están dados por las siguientes ecuaciones, [2]:

$$C_L = \frac{C_0}{k} \left( 1 - (1 - k)e^{-\frac{kvx}{D_L}} \right) \quad (2.6)$$

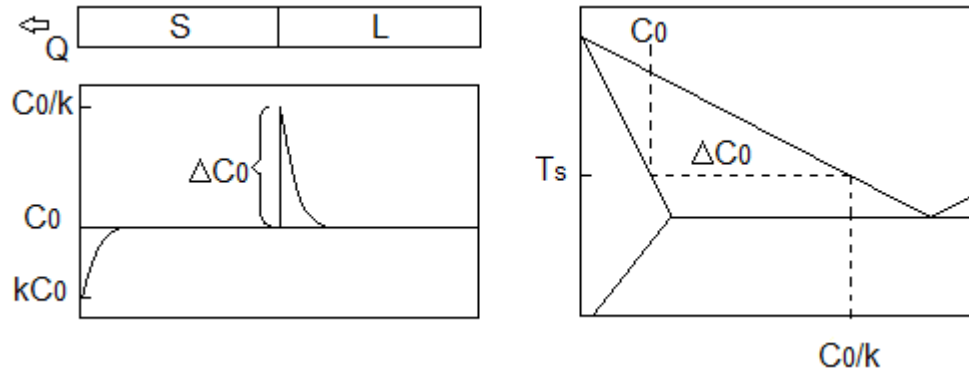
$$C_S = C_0 \left( 1 - (1 - k)e^{-\frac{kvx}{D_L}} \right) \quad (2.7)$$

Donde  $v$  = Velocidad de avance (m/s)

$D_L$  = Coeficiente de difusión del soluto en el líquido ( $m^2/s$ )

$x$  = Distancia (m)

Una vez que se supera el transitorio inicial, se alcanza un estado estable, en donde la cantidad de soluto expulsado es igual a la cantidad de soluto que difunde a través de la capa limite, fig. 2.6.



**Figura 2.6. Perfiles de concentración en estado estable. En esta etapa la solidificación se lleva a cabo a la  $T_s$  marcada en el diagrama de fases.**

En este punto la  $C_s = C_0$  y la concentración a través de la capa límite está dada por la siguiente ecuación, [5]:

$$C_L = C_0 \left( 1 + \left( \frac{1-k}{k} \right) e^{-\frac{vx}{D_L}} \right) \quad (2.8)$$

Finalmente cuando el espesor de la capa límite es igual al espesor del líquido remanente, la difusión hacia el líquido se ve impedida por la pared del crisol. Esto provoca que la concentración del líquido en la intercara empiece a incrementar hasta sobrepasar el valor de  $C_0/k$  y por lo tanto la concentración del sólido también aumenta su valor por encima de  $C_0$ . A esta etapa se le denomina transitorio final. Esta última etapa es más pequeña que el transitorio inicial, su longitud es del orden de  $D_L/v$

Como se puede ver este tipo de solidificación tiene como resultado un sólido de composición uniforme excepto por el inicio y el final de la pieza, como resultado de los transitorios, fig.2.7.



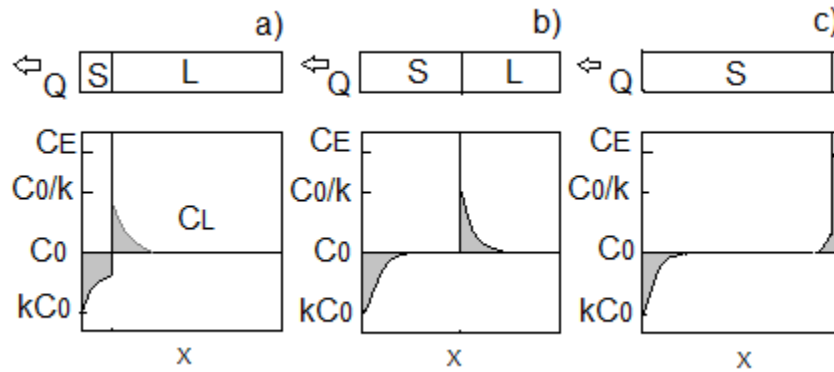


Figura 2.7. Perfiles de concentración a lo largo de las tres etapas: a) transitorio inicial, b) estado estable y c) transitorio final.

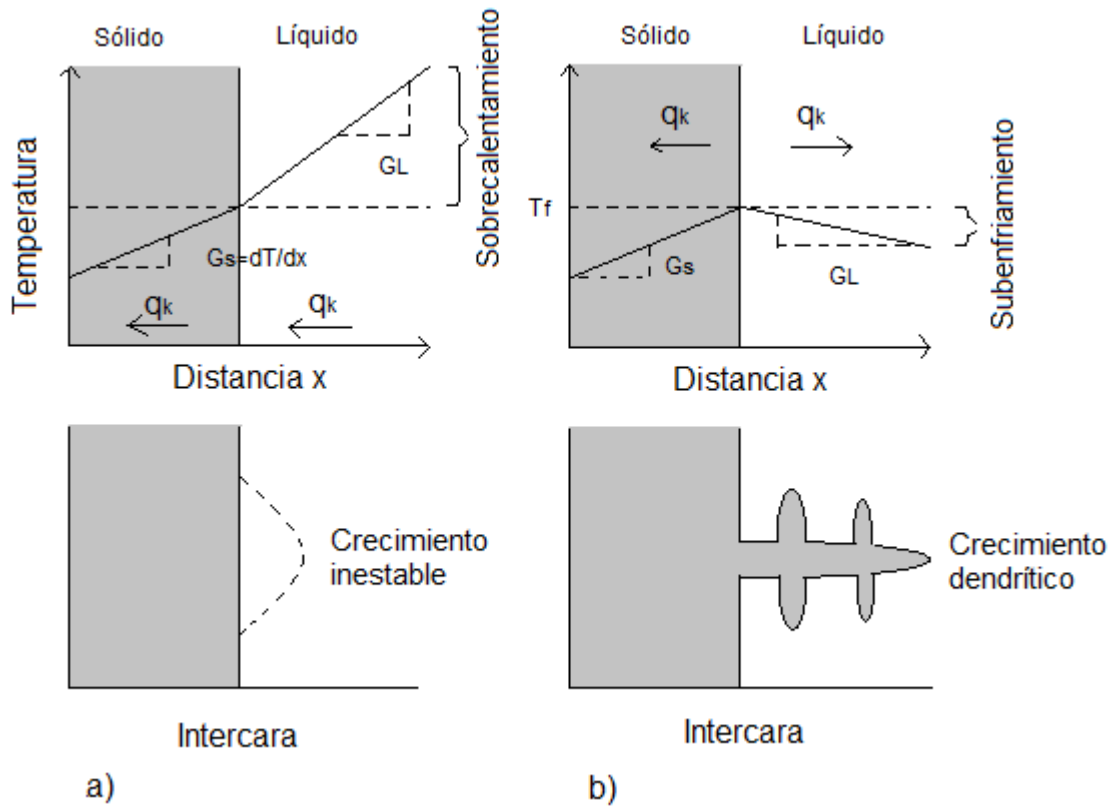
## 2.2 Estabilidad de la intercara sólido-líquido.

Cuando se habla de metales puros, la estabilidad de la intercara sólido-líquido se ve afectada únicamente por el gradiente de temperatura en el líquido que se encuentra justo enfrente de ella.

En la figura 2.8a se muestra el caso en donde todo el calor latente que se encuentra en la intercara fluye a través del sólido y los gradientes de temperatura en el sólido y en el líquido,  $G_S$  y  $G_L$ , son positivos. El frente de solidificación que avanza a una velocidad  $v$ , es estable y planar. Cualquier protuberancia sólida que se forme en la intercara se encontrará con un líquido sobrecalentado y tenderá a fundirse nuevamente, [6].

Por otra parte si el calor latente fluye tanto por el sólido como por el líquido, figura 2.8b, el gradiente en el líquido,  $G_L$ , se vuelve negativo. La intercara se vuelve inestable y pequeñas protuberancias en forma de puntas llamadas dendritas crecen rápidamente en el líquido subenfriado.

En el caso de aleaciones, aparte de considerar el efecto del gradiente térmico es necesario tomar en cuenta el efecto del gradiente de concentraciones en el líquido de la intercara y la velocidad de avance,  $v$ .



**Figura 2.8. (a) Frente plano de solidificación y (b) solidificación dendrítica de un metal puro, como consecuencia de los gradientes térmicos.**

Como ya se explicó en la sección 2.1.3, cuando se alcanza el estado estable, se obtiene un gradiente de concentraciones enfrente de la intercara, fig. 2.9c. Dicho perfil se representa por la ecuación 2.8. Como consecuencia de esta segregación de soluto, se produce una variación en la temperatura de liquidus, la cual se muestra en la figura 2.9b.

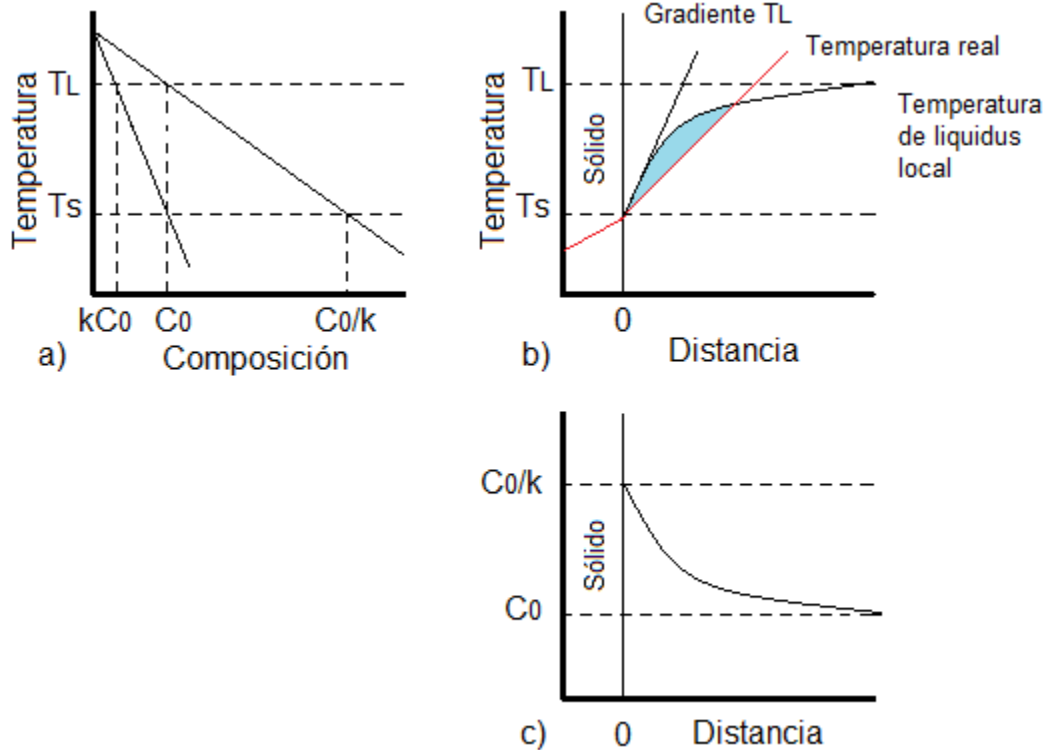


Figura 2.9. a) Fracción de un diagrama de fase binario, b) perfil de temperatura liquidus debido al cambio de concentración enfrente de la intercara sólido-liquido. En este caso el gradiente de la temperatura liquidus es mayor al gradiente de la temperatura real, por lo tanto se presenta una zona de subenfriamiento constitucional, representada por la zona sombreada, c) perfil de concentraciones en el líquido justo enfrente de la intercara sólido-liquido.

La variación de la temperatura liquidus se puede representar por la siguiente ecuación:

$$T_L = T_f + m_L C_L \quad (2.9)$$

Si se sustituye la ecuación 2.8 en 2.9 se obtiene una expresión para la temperatura de liquidus en función de la distancia.

$$T_L = T_f - m_L C_0 \left[ 1 + \frac{1-k}{k} e \left( -\frac{vx}{D_L} \right) \right] \quad (2.10)$$

Donde  $T_f$  es la temperatura de fusión del solvente.

$m_L$  es el valor de la pendiente de la línea de liquidus

La temperatura de liquidus local que se representa con la ecuación 2.10, no siempre es la misma temperatura que se obtiene por el gradiente térmico al extraer el calor. Si el líquido se encuentra a una temperatura menor que la temperatura de liquidus local, se dice que existe un subenfriamiento constitucional y la intercara sólido-líquido se vuelve inestable.

En otras palabras, para que la intercara sólido-líquido sea estable se debe cumplir la siguiente condición:

$$\left(\frac{dT_L}{dx}\right)_{x=0} \leq \left(\frac{dT_R}{dx}\right)_{x=0} \quad (2.11)$$

En donde  $T_R$  es la temperatura impuesta por la extracción de calor o temperatura real, fig.2.9b.

La ecuación 2.11 es una desigualdad entre dos gradientes, el de la temperatura de liquidus y el de la temperatura real,  $G_L$  y  $G_R$  respectivamente.

Para conocer el valor del gradiente de la temperatura liquidus es necesario derivar la ecuación 2.10 con respecto a la posición, y se obtiene la siguiente expresión, [7]:

$$\left.\frac{dT_L}{dx}\right|_{x=0} = -m_L \frac{C_0(1-k)v}{D_L k} \quad (2.12)$$

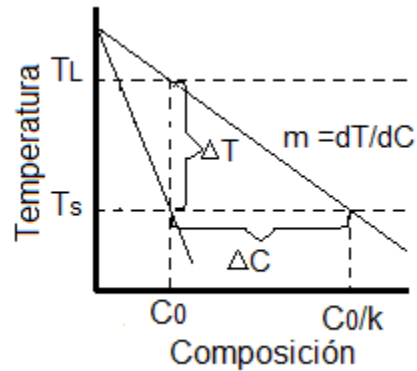


Figura 2.10. Diagrama de fases simplificado.

De acuerdo a la figura 2.10, se pueden obtener las siguientes expresiones:

$$\Delta T = -m\Delta C = T_L - T_S \quad (2.13)$$

$$\Delta C = C_0 \left( \frac{1-k}{k} \right) \quad (2.14)$$

Remplazando las ecuaciones 2.14 y 2.13 en la ecuación 2.12 se obtiene:

$$G_L = \frac{v\Delta T}{D_L} \quad (2.15)$$

La ecuación 2.15 representa el valor límite para que la intercara sólido-líquido sea estable, por debajo de este valor se presentará el fenómeno de subenfriamiento constitucional, sin embargo solo es una aproximación, debido a que no toma en consideración el gradiente de temperatura en el sólido y el efecto de la energía interfacial, la cual puede tener un valor significativo debido a que la formación de protuberancias va acompañada de un incremento en el área superficial, [4].

En la práctica la mayoría de las aleaciones solidifican a velocidades altas por lo tanto es muy poco probable que presenten un crecimiento planar.

### **2.3 Solidificación Celular.**

Como se ha visto, la forma de la intercara se ve afectada principalmente por la velocidad de avance y por el gradiente de temperatura en la intercara sólido-líquido. Para un gradiente de temperaturas y una composición fija, se pueden obtener cuatro morfologías, dependiendo del valor de la velocidad, fig.2.11. Por arriba de la velocidad a la que se obtiene una intercara planar, la cual se puede identificar como velocidad crítica, aparece la morfología celular, si el valor de la velocidad sigue aumentando se puede presentar la intercara celular-dendrítica y finalmente la dendrítica, [8].

Inmediatamente que se rebasa la velocidad crítica, aparece la morfología celular que tiene como característica una longitud muy pequeña y del mismo orden que el espaciamiento entre celdas. A velocidades más grandes se presenta la estructura celular-dendrítica, esta estructura presenta una longitud mucho mayor que el espaciamiento entre celdas y además la punta de la celda asume una forma más afilada, muy parecida a una parábola, fig. 2.11b.

La formación de estructuras celulares aumenta la segregación de soluto en el sólido. La punta de la celda se encuentra a mayor temperatura que la base. Para una aleación con  $k < 1$ , el sólido que se forma en la punta de la celda tiene una menor concentración de soluto que el sólido que se forma en la base de la celda. El perfil de concentración desde la base a la punta de la celda puede aproximarse con las ecuaciones de Scheil, ecuaciones 2.4 y 2.5. Aunque, como ya se mencionó con anterioridad estas ecuaciones tienen ciertas limitaciones, una de ellas es que no toma en consideración la difusión en el sólido.

Para el caso en el que la difusión en el sólido tiene una mayor importancia, es preferible emplear la relación de segregación (SR), [4].

$$SR = 1 + \frac{l \cdot G_M}{\Delta T} \quad (2.16)$$

Donde  $l$  es la longitud de la celda.

$G_M$  es el gradiente de temperatura promedio entre las dos fases.

$\Delta T$  es el subenfriamiento de la punta de la celda.

Las estructuras de tipo celular se presentan en fundiciones donde el flujo de calor produce una solidificación direccional y en aleaciones que tienen rangos de solidificación muy pequeños.

#### **2.4 Solidificación Dendrítica.**

La estructura de tipo dendrítico se presenta muy alejada de las condiciones de estabilidad de la interfase planar, indicadas por la ecuación 2.15. Una zona amplia de subenfriamiento constitucional es necesaria para que la morfología sea dendrítica, fig. 2.11d. Las dendritas (palabra derivada del griego  $\delta\epsilon\upsilon\delta\rho\omega\upsilon$  que significa árbol) son cristales ramificados cuya morfología refleja direccionalidad cristalográfica, presentan un brazo principal y ramificaciones secundarias e incluso terciarias, [2].

Al observar la morfología de una sola dendrita se puede distinguir que la punta tiene una forma de parábola, y que por lo general constituye menos del 1% de la longitud total de la dendrita, en esta parte aparecen pequeñas protuberancias o ramificaciones que reciben el nombre de brazos secundarios, los cuales crecen en forma perpendicular al brazo primario o tronco y tienen un espaciamiento uniforme, conocido como espaciamiento secundario,  $\lambda_2$ , fig. 2.12. Los brazos secundarios presentan un crecimiento inicial, sin embargo una vez que los campos de difusión en sus puntas interactúan con aquellos de las dendritas vecinas, el crecimiento de los brazos secundarios se reduce y da comienzo un proceso de engrosamiento que tiene como finalidad reducir la energía interfacial. Por tal

motivo el primer espaciamiento secundario, el que se forma en la punta de la dendrita es mucho más pequeño que el espaciamiento secundario final, es decir el que se encuentra más cercano a la base de la dendrita, [1].

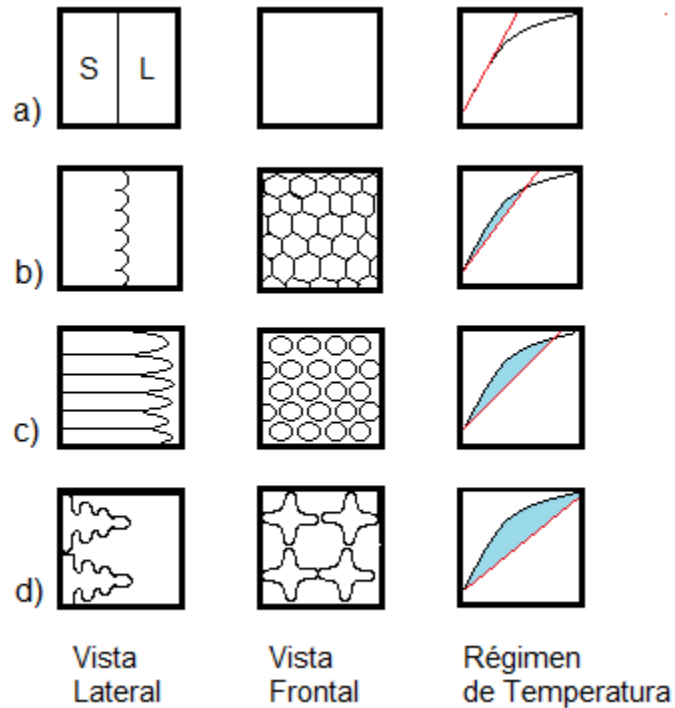


Figura 2.11. Representación esquemática del cambio de morfología en la intercara sólido-líquida, al aumentar la velocidad de avance. a) Intercara planar, b) Intercara celular, c) Intercara celular dendrítica, d) Intercara dendrítica.

El valor final de  $\lambda_2$  es en gran parte determinado por el tiempo de contacto entre los brazos y el metal fundido. Este periodo es conocido como el tiempo local de solidificación,  $t_f$ . Para solidificación direccional  $t_f$  es igual a la siguiente expresión:

$$t_f = \frac{L}{v} \tag{2.17}$$

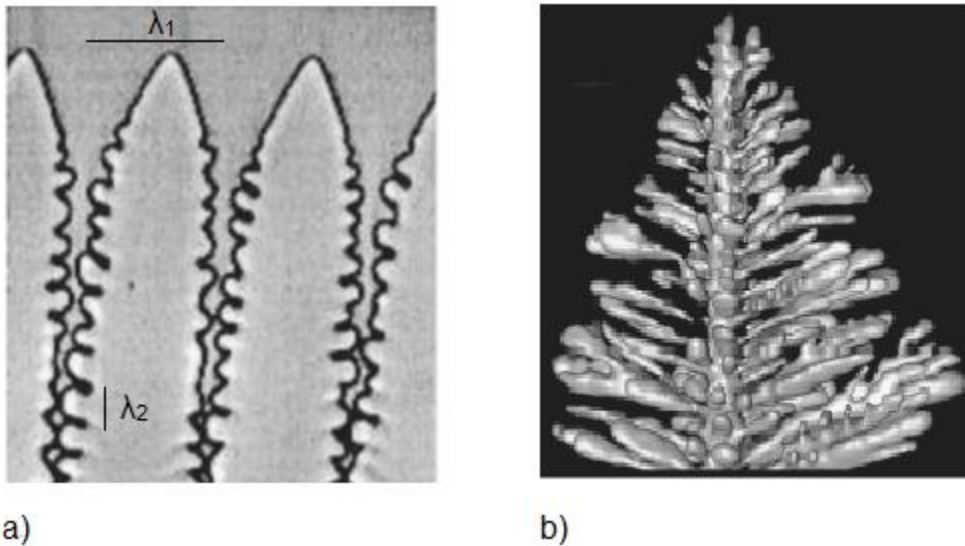
Donde  $L$  es la longitud de la dendrita primaria y  $v$  es la velocidad de solidificación impuesta, [4].



Existe una expresión que relaciona el espaciamiento secundario con el tiempo local de solidificación.

$$\lambda_2 = at_f^{\frac{1}{3}} \quad (2.18)$$

Donde  $a$  es una constante que depende de varios parámetros del sistema como lo son el coeficiente de difusión del soluto en el líquido, la energía interfacial sólido-líquido y el rango de solidificación de la aleación, [4].



**Figura 2.12. a) Representación esquemática del espaciamiento primario y secundario dendrítico. b) Representación tridimensional de una dendrita. [8]**

Otro parámetro importante para las estructuras dendríticas es la longitud de la dendrita, la cual es dada por la relación, [4].

$$L = \frac{T_t - T_b}{G_M} \quad (2.19)$$

Donde  $T_t$  es la temperatura de la punta de la dendrita

$T_b$  es la temperatura de la base de la dendrita.

$G_M$  es el promedio de los gradientes de temperatura sólido y líquido en la intercara.

Bajo la mayoría de las condiciones de vaciado, el subenfriamiento de la punta de las dendritas es muy pequeño, tanto que la temperatura de las puntas de las dendritas puede considerarse igual a  $T_L$ .

### **2.5 Modelado Matemático.**

Un modelo matemático se puede definir como un conjunto de ecuaciones algebraicas o diferenciales que son utilizadas para representar y predecir el comportamiento de algún fenómeno específico, [9].

Los modelos matemáticos se pueden clasificar de la siguiente forma, [9-10].

- a) Modelos mecanísticos o fundamentales, los cuales se basan en leyes físicas y/o químicas, tales como el equilibrio termodinámico, la cinética química, la transferencia de calor, el flujo de fluidos y la transferencia de masa.
- b) Modelos semi-empíricos basados principalmente en leyes fundamentales pero que al mismo tiempo emplean datos o relaciones empíricas.
- c) Modelos de caja negra que únicamente se basan en las observaciones de un sistema en particular y usan relaciones completamente empíricas entre las variables del sistema o proceso.

El modelado matemático es sólo una de las herramientas que se tiene para analizar un proceso metalúrgico; existen también el modelado físico y la medición de datos en planta.

De hecho, para obtener una mayor comprensión de un proceso, es necesario emplear las tres herramientas antes mencionadas en conjunto. Los resultados obtenidos de estas formas son empleados para diseñar nuevos procesos o para optimizar procesos ya establecidos. El uso de estas herramientas de análisis tiene como objetivo, no sólo generar conocimiento sobre el sistema, sino también traducir ese conocimiento en mejoras en la producción y calidad del proceso, siempre sin hacer de lado el factor económico.

El modelado se ha aplicado desde la segunda mitad del siglo pasado en los procesos metalúrgicos, así que hoy en día se puede decir que la totalidad de ellos han sido modelados. La información desarrollada en el caso de la solidificación es abundante. Durante este proceso ocurren muchos fenómenos simultáneamente a diferentes escalas. La mayoría de los modelos desarrollados se pueden dividir en cuatro grandes grupos, [11].

1. Modelos de Macro-escala. Esta escala es del orden de  $10^{-3}$  a  $10^0$  m. A este nivel se presentan la macrosegregación, las cavidades y grietas por contracción, la rugosidad superficial, “cold shut” y las dimensiones finales de la pieza. En esta escala sólo se considera que existen dos fases, el sólido y el líquido, que se encuentran separadas por una intercara S/L bien definida. Los modelos en este nivel están basados en la solución de ecuaciones de conservación de masa, momentum y energía. Los resultados arrojados por los modelos se presentan como perfiles de temperatura y de composición (macrosegregación) e incluso pueden predecir el fenómeno de contracción.
2. Modelos de Meso-escala. Esta escala es del orden de  $10^{-4}$  m. La intercara S/L es más compleja de describir porque no existe un límite definido, de hecho se consideran tres regiones: líquido, “mushy” y sólido. Los modelos de transporte desarrollados para macro-escala pueden ser combinados con

modelos de cinética de transformación, para predecir la evolución de la microestructura y densidad volumétrica de los granos.

3. Modelos de Micro-escala. Esta escala es del orden de  $10^{-6}$  a  $10^{-5}$  m. Aquí se describe la morfología de los granos, se puede conocer el tamaño, el tipo, el espaciado interdendrítico, la microsegregación, las inclusiones y las microporosidades.
4. Modelos de Nano-escala. Aquí se trata la solidificación en un orden de escala de  $10^{-9}$  m, en términos de cinética de nucleación y crecimiento. Se consideran átomos individuales que avanzan a través de la intercara S/L. Estos modelos son los más recientes y en los que el desarrollo de hardware todavía es una limitante, son muy complejos y poco prácticos para la industria.

## CAPÍTULO 3 MODELO MATEMÁTICO

### 3.1 Descripción del Sistema.

El sistema incluye al fenómeno de solidificación de un volumen de aleación Al-Cu4.5% que se encuentra contenida en un molde cilíndrico refractario. Para garantizar la unidireccionalidad, la probeta cuenta con una resistencia eléctrica que suministra energía en la parte superior y que mantiene esta zona a temperatura constante. En la parte inferior de la probeta se encuentra una placa delgada de un metal con una alta conductividad térmica que es enfriada con un chorro de agua, de manera similar que una probeta de ensayo Jominy, fig. 3.1.

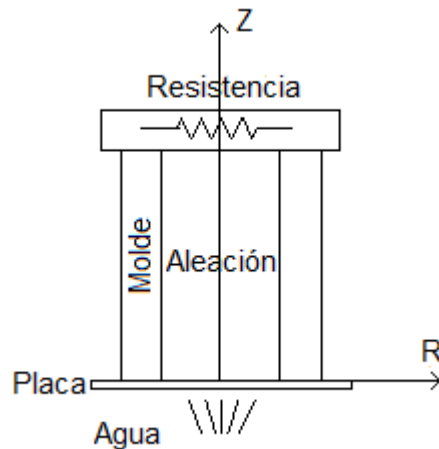


Figura 3.1. Esquema físico del sistema.

### 3.2 Simplificaciones.

Una vez descrito físicamente el sistema a modelar, el siguiente paso es representarlo matemáticamente. Para ello es necesario hacer ciertas simplificaciones que faciliten los cálculos, pero que no pierdan correspondencia con la descripción física.

El principal fenómeno que se considera es la transferencia de calor por conducción con un cambio de fase. En otras palabras el modelo sólo toma en consideración la transferencia de energía y lo hace con un enfoque macroscópico.

La extracción de calor por la parte inferior y la adición en la parte superior es lo que proporciona la unidireccionalidad, es decir, el flujo de calor es principalmente axial; sin embargo se pierde una cantidad de calor radialmente, y para cuantificar su efecto el modelo la considera.

El sistema de interés es el volumen de metal que se encuentra contenido y que solidifica. El efecto que tienen las fronteras físicas inferior, lateral y superior son representadas por condiciones convectivas. Debido a que la placa metálica colocada en la parte inferior sólo es de contención, es decir tiene un espesor mínimo y una alta conductividad, y por lo tanto no presenta una resistencia al flujo de calor, en el modelo se elimina y únicamente se toma en consideración el flujo de calor extraído por convección.

El flujo de calor que se escapa por la pared del molde se sustituye por una condición de frontera convectiva, en donde el valor de  $h_c$  toma en consideración el efecto debido a la radiación y a la convección natural, ver apéndice A.1. Esta condición convectiva es un valor límite máximo ya que el efecto producido por cualquier material refractario sería mucho menor.

Por último el efecto de la resistencia que mantiene la temperatura constante en la parte superior, es remplazado por otra condición convectiva en donde la  $T_\infty$  se fija y se usa un  $h_c$  con un valor extremadamente alto para garantizar un flujo de calor muy grande que mantenga la temperatura constante.

Las propiedades termofísicas varían con respecto al estado de agregación (líquido, “mushy”, sólido) pero no con la temperatura, ver apéndice A.2. Las propiedades de conductividad térmica y densidad para la zona “mushy” se calculan como un valor promedio de las propiedades correspondientes del sólido y líquido.

Uno de los puntos más importantes en el modelado de la solidificación es la representación del calor generado durante el cambio de fase. Uno de los métodos más comunes consiste en incluir este calor como una función de la fracción solidificada, pero para obtener el valor de la fracción es necesario además emplear un modelo de microsegregación como los descritos en la sección 2.1. Para ahorrar este paso se emplea el Método del Cp, [12] el cual consiste en definir el Cp de la zona mushy de la siguiente manera:

$$Cp_M = Cp_L + \left( \frac{\Delta H_f}{T_L - T_S} \right) \quad (3.1)$$

En donde  $Cp_L$  es la capacidad calorífica del líquido,

$\Delta H_f$  es el calor latente de fusión,

$T_L$  es la temperatura de liquidus de la aleación y

$T_S$  es la temperatura de solidus de la aleación.

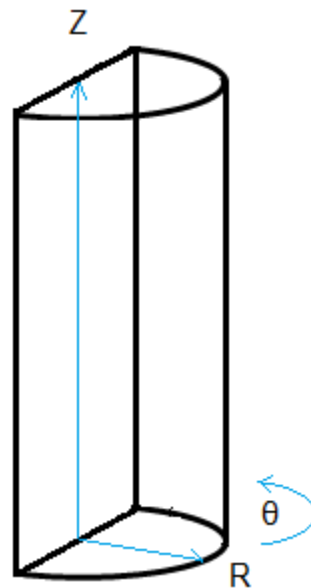
Como se puede observar el calor latente de fusión es adicionado al  $Cp_L$  sobre el rango de temperaturas en el que ocurre la solidificación, de esta forma se toma en consideración el  $\Delta H_f$  en la zona “mushy”, lo anterior permite que los cálculos se lleven a cabo directamente en la ecuación de calor y evitan el uso de tratamientos adicionales en la intercara S/L.

Resumiendo, las simplificaciones tomadas para la elaboración del modelo son las siguientes:

- Las propiedades de conductividad térmica, capacidad calorífica y densidad varían con cada fase presente (líquido, “mushy” y sólido) pero no con la temperatura.
- Las propiedades de conductividad térmica y densidad del sólido para la fase “mushy” son un promedio de las propiedades del sólido y del líquido. Para calcular la capacidad calorífica de la fase mushy se emplea el Método del Cp.

- El flujo de calor dentro de la aleación es transportado únicamente por conducción y tiene dos componentes: radial y axial.
- El molde se llena instantáneamente.
- No existen corrientes convectivas dentro del sistema.
- La temperatura es homogénea a lo largo de todo el sistema al inicio del proceso.
- Las tres fronteras se toman como si fueran fronteras convectivas, con diferentes valores de  $h_C$ .

Con estas simplificaciones el sistema de referencia es el siguiente:



**Figura 3.2.** Esquema del sistema de referencia. Por la simetría del sistema solo se toma en consideración la mitad del cilindro.

La ecuación de calor que se debe resolver es la siguiente, [18, 19]:

$$\frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left( kr \frac{\partial T}{\partial r} \right) + \frac{\partial}{\partial z} \left( k \frac{\partial T}{\partial z} \right) = \rho C_p \frac{\partial T}{\partial t} \quad (3.2)$$



Las condiciones inicial y de frontera son:

C.I.

$$\bullet T(r, z) = T_0 \quad \text{para } 0 \leq r \leq R, \quad \text{para } 0 \leq z \leq Z \quad \text{y } t = 0$$

C.F.

- 1)  $k \frac{\partial T}{\partial r} = 0$  para  $r = 0$  y  $t > 0$
- 2)  $k \frac{\partial T}{\partial r} = h_{c2}(T_{(\infty)} - T_{(r,z)})$  para  $r = R$  y  $t > 0$
- 3)  $k \frac{\partial T}{\partial z} = h_{c1}(T_{(\infty)} - T_{(r,z)})$  para  $z = 0$  y  $t > 0$
- 4)  $k \frac{\partial T}{\partial z} = h_{c3}(T_{(\infty)} - T_{(r,z)})$  para  $z = Z$  y  $t > 0$

### **3.3 Método de solución.**

El tratar de resolver por un medio analítico, la ecuación 3.2 con las condiciones que previamente se han escrito, resulta imposible. La única forma práctica de solución es emplear un método numérico. El presente trabajo hace uso del método de diferencias finitas en su forma explícita.

El método consiste en la división del sistema en pequeñas secciones. La figura ficticia de un nodo es colocado en el centro de cada sección. Posteriormente se desarrolla un balance de energía para cada nodo, el cual tiene como finalidad la obtención de una ecuación algebraica para la temperatura de cada nodo, en términos de las temperaturas nodales de los alrededores, de la geometría y de las propiedades térmicas del sistema, [13]. Como el sistema se encuentra en estado transitorio, es decir, varía con respecto al tiempo, es necesario representar la energía que se acumula. Esta energía se refleja en el incremento de energía interna de cada nodo, la propiedad termodinámica que regula esta acumulación de energía es el Cp. Por eso, la importancia de haber definido esta propiedad para la zona mushy con ayuda de la ecuación 3.1.

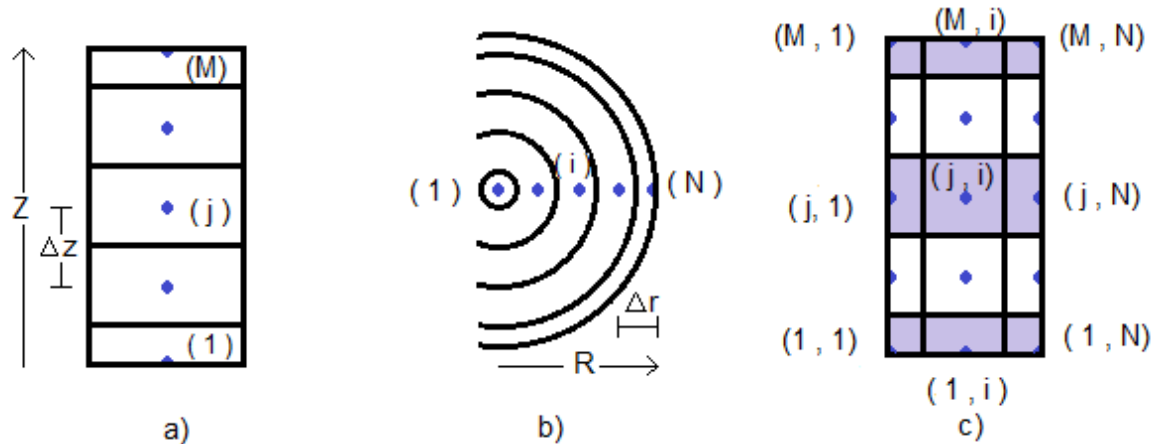


Figura. 3.3. Esquema de la discretización a) en dirección axial, b) en sentido radial. Es importante señalar que  $\Delta r$  y  $\Delta z$  no son iguales. c) Vista lateral de la mitad del sistema, donde se muestra la posición de las 9 familias nodales. Los nodos que se encuentran en el lado izquierdo, en realidad están ubicados en el centro del sistema.

Como ya se mencionó, el primer paso consiste en discretizar o dividir al sistema. El modelo es bidireccional por tal motivo la división se lleva a cabo en la dirección axial y en la dirección radial.

En la dirección axial la distancia nodal se expresa de la siguiente forma

$$\Delta z = \frac{Z}{(M-1)} \tag{3.3}$$

en donde  $M$  es el número total de nodos y  $Z$  es la longitud total del sistema, fig. 3.3a.

Para la dirección radial la distancia nodal se expresa de la misma forma

$$\Delta r = \frac{R}{(N-1)} \tag{3.4}$$

en donde  $N$  es el número total de nodos y  $R$  es el radio del sistema, fig. 3.3b.

El dividir el sistema en la dirección axial, genera 3 clases de familias nodales diferentes. Al discretizar en la dirección radial se obtienen, igualmente, 3 clases de familias nodales. Al tomar en consideración ambas discretizaciones se obtiene el

número total de familias nodales características del sistema, las cuales son 9 y se muestran en la fig. 3.3 c.

El método de diferencias finitas requiere de conocer el área por donde circula el flujo de calor y el volumen de cada nodo. Estos valores están presentados en la tabla 3.1.

**TABLA 3.1 Áreas y volúmenes requeridas en el método de diferencias finitas. Estos valores se expresan en función de  $\Delta r$  ,  $\Delta z$  , el número de nodo  $i$ -ésimo en dirección radial,  $i$  y el número total de nodos en la dirección radial,  $N$ .**

Nodo	Área superior (Au) y Área inferior (Ad)	Área Interna (AI)	Área Externa (Ar)	Volumen (V)
( 1, 1 )	$\frac{\pi}{4} \Delta r^2$	No aplica	$\frac{\pi \Delta r \Delta z}{2}$	$\frac{\pi \Delta r^2 \Delta z}{8}$
( 1, i )	$(2i - 2)\pi \Delta r^2$	$(i - 1.5)\pi \Delta r \Delta z$	$(i - 0.5)\pi \Delta r \Delta z$	$(i - 1)\pi \Delta r^2 \Delta z$
( 1, N )	$(N - 1.25)\pi \Delta r^2$	$(N - 1.5)\pi \Delta r \Delta z$	$(N - 1)\pi \Delta r \Delta z$	$\left(\frac{N}{2} - \frac{5}{8}\right) \pi \Delta r^2 \Delta z$
( j, 1 )	$\frac{\pi}{4} \Delta r^2$	No aplica	$\pi \Delta r \Delta z$	$\frac{\pi \Delta r^2 \Delta z}{4}$
( j, i )	$(2i - 2)\pi \Delta r^2$	$2(i - 1.5)\pi \Delta r \Delta z$	$2(i - 0.5)\pi \Delta r \Delta z$	$2(i - 1)\pi \Delta r^2 \Delta z$
( j, N )	$(N - 1.25)\pi \Delta r^2$	$2(N - 1.5)\pi \Delta r \Delta z$	$2(N - 1)\pi \Delta r \Delta z$	$\left(N - \frac{5}{4}\right) \pi \Delta r^2 \Delta z$
( M, 1 )	$\frac{\pi}{4} \Delta r^2$	No aplica	$\frac{\pi \Delta r \Delta z}{2}$	$\frac{\pi \Delta r^2 \Delta z}{8}$
( M, i )	$(2i - 2)\pi \Delta r^2$	$(i - 1.5)\pi \Delta r \Delta z$	$(i - 0.5)\pi \Delta r \Delta z$	$(i - 1)\pi \Delta r^2 \Delta z$
( M, N )	$(N - 1.25)\pi \Delta r^2$	$(N - 1.5)\pi \Delta r \Delta z$	$(N - 1)\pi \Delta r \Delta z$	$\left(\frac{N}{2} - \frac{5}{8}\right) \pi \Delta r^2 \Delta z$

Una vez que se discretiza el sistema y que se conocen las áreas y volúmenes de cada nodo el siguiente paso es realizar el balance de energía para cada nodo. En el apéndice A.3 se detalla uno de estos balances. A continuación se presentan los balances finales para cada una de las familias nodales.

**TABLA 3.2. Valor de las literales empleadas en los balances de energía.**

$A = \frac{\alpha \Delta t}{\Delta z}$	$B = \frac{\alpha \Delta t}{\Delta r}$	$C = \frac{h_{c1} \Delta t}{\rho C p}$	$D = \frac{h_{c2} \Delta t}{\rho C p}$	$E = \frac{h_{c3} \Delta t}{\rho C p}$
--	--	--	--	--

**Nodo (1,1)**

$$\begin{aligned} A \frac{Au_{(1,1)}}{V_{(1,1)}} [T_{(j,1)}^t] + B \frac{Ar_{(1,1)}}{V_{(1,1)}} [T_{(1,i)}^t] + C \frac{Ad_{(1,1)}}{V_{(1,1)}} [T_{\infty 1}^t] \\ + \left[ 1 - A \frac{Au_{(1,1)}}{V_{(1,1)}} - B \frac{Ar_{(1,1)}}{V_{(1,1)}} - C \frac{Ad_{(1,1)}}{V_{(1,1)}} \right] [T_{(1,1)}^t] = [T_{(1,1)}^{t+\Delta t}] \end{aligned} \quad (3.5)$$

**Nodo (1, i)**

$$\begin{aligned} A \frac{Au_{(1,i)}}{V_{(1,i)}} [T_{(j,i)}^t] + B \frac{Al_{(1,i)}}{V_{(1,i)}} [T_{(1,i-1)}^t] + B \frac{Ar_{(1,i)}}{V_{(1,i)}} [T_{(1,i+1)}^t] + C \frac{Ad_{(1,i)}}{V_{(1,i)}} [T_{\infty 1}^t] \\ + \left[ 1 - A \frac{Au_{(1,i)}}{V_{(1,i)}} - B \frac{Al_{(1,i)}}{V_{(1,i)}} - B \frac{Ar_{(1,i)}}{V_{(1,i)}} - C \frac{Ad_{(1,i)}}{V_{(1,i)}} \right] [T_{(1,i)}^t] = [T_{(1,i)}^{t+\Delta t}] \end{aligned} \quad (3.6)$$

**Nodo (1,N)**

$$\begin{aligned} A \frac{Au_{(1,N)}}{V_{(1,N)}} [T_{(j,N)}^t] + B \frac{Al_{(1,N)}}{V_{(1,N)}} [T_{(1,N-1)}^t] + C \frac{Ad_{(1,N)}}{V_{(1,N)}} [T_{\infty 1}^t] + D \frac{Ar_{(1,N)}}{V_{(1,N)}} [T_{\infty 2}^t] \\ + \left[ 1 - A \frac{Au_{(1,N)}}{V_{(1,N)}} - B \frac{Al_{(1,N)}}{V_{(1,N)}} - C \frac{Ad_{(1,N)}}{V_{(1,N)}} - D \frac{Ar_{(1,N)}}{V_{(1,N)}} \right] [T_{(1,N)}^t] = [T_{(1,N)}^{t+\Delta t}] \end{aligned} \quad (3.7)$$

**Nodo (j,1)**

$$\begin{aligned} A \frac{Ad_{(j,1)}}{V_{(j,1)}} [T_{(j-1,1)}^t] + A \frac{Au_{(j,1)}}{V_{(j,1)}} [T_{(j+1,1)}^t] + B \frac{Ar_{(j,1)}}{V_{(j,1)}} [T_{(j,1)}^t] \\ + \left[ 1 - A \frac{Ad_{(j,1)}}{V_{(j,1)}} - A \frac{Au_{(j,1)}}{V_{(j,1)}} - B \frac{Ar_{(j,1)}}{V_{(j,1)}} \right] [T_{(j,i)}^t] = [T_{(j,i)}^{t+\Delta t}] \end{aligned} \quad (3.8)$$

**Nodo (j, i)**

$$\begin{aligned} A \frac{Au_{(j,i)}}{V_{(j,i)}} [T_{(j+1,i)}^t] + A \frac{Ad_{(j,i)}}{V_{(j,i)}} [T_{(j-1,i)}^t] + B \frac{Al_{(j,i)}}{V_{(j,i)}} [T_{(j,i-1)}^t] + B \frac{Ar_{(j,i)}}{V_{(j,i)}} [T_{(j,i+1)}^t] \\ + \left[ 1 - A \frac{Au_{(j,i)}}{V_{(j,i)}} - A \frac{Ad_{(j,i)}}{V_{(j,i)}} - B \frac{Al_{(j,i)}}{V_{(j,i)}} - B \frac{Ar_{(j,i)}}{V_{(j,i)}} \right] [T_{(j,i)}^t] = [T_{(j,i)}^{t+\Delta t}] \end{aligned} \quad (3.9)$$

**Nodo (j,N)**

$$\begin{aligned} A \frac{Au_{(j,N)}}{V_{(j,N)}} [T_{(j+1,N)}^t] + A \frac{Ad_{(j,N)}}{V_{(j,N)}} [T_{(j-1,N)}^t] + B \frac{Al_{(j,N)}}{V_{(j,N)}} [T_{(j,N-1)}^t] + D \frac{Ar_{(j,N)}}{V_{(j,N)}} [T_{\infty 2}^t] \\ + \left[ 1 - A \frac{Au_{(j,N)}}{V_{(j,N)}} - A \frac{Ad_{(j,N)}}{V_{(j,N)}} - B \frac{Al_{(j,N)}}{V_{(j,N)}} - D \frac{Ar_{(j,N)}}{V_{(j,N)}} \right] [T_{(j,N)}^t] = [T_{(j,N)}^{t+\Delta t}] \end{aligned} \quad (3.10)$$

**Nodo (M,1)**

$$\begin{aligned} A \frac{Ad_{(M,1)}}{V_{(M,1)}} [T_{(M-1,1)}^t] + B \frac{Ar_{(M,1)}}{V_{(M,1)}} [T_{(M,i)}^t] + E \frac{Au_{(M,1)}}{V_{(M,1)}} [T_{\infty 3}^t] \\ + \left[ 1 - A \frac{Ad_{(M,1)}}{V_{(M,1)}} - B \frac{Ar_{(M,1)}}{V_{(M,1)}} - E \frac{Au_{(M,1)}}{V_{(M,1)}} \right] [T_{(M,1)}^t] = [T_{(M,1)}^{t+\Delta t}] \end{aligned} \quad (3.11)$$

**Nodo (M,i)**

$$\begin{aligned} & A \frac{Ad_{(M,i)}}{V_{(M,i)}} [T_{(M-1,i)}^t] + B \frac{Al_{(M,i)}}{V_{(M,i)}} [T_{(M,i-1)}^t] + B \frac{Ar_{(M,i)}}{V_{(M,i)}} [T_{(M,i+1)}^t] + E \frac{Au_{(M,i)}}{V_{(M,i)}} [T_{\infty 3}^t] \\ & + \left[ 1 - A \frac{Ad_{(M,i)}}{V_{(M,i)}} - B \frac{Al_{(M,i)}}{V_{(M,i)}} - B \frac{Ar_{(M,i)}}{V_{(M,i)}} - E \frac{Au_{(M,i)}}{V_{(M,i)}} \right] [T_{(M,i)}^t] = [T_{(M,i)}^{t+\Delta t}] \end{aligned} \quad (3.12)$$

**Nodo (M,N)**

$$\begin{aligned} & A \frac{Ad_{(M,N)}}{V_{(M,N)}} [T_{(M-1,N)}^t] + B \frac{Al_{(M,N)}}{V_{(M,N)}} [T_{(M,N-1)}^t] + D \frac{Ar_{(M,N)}}{V_{(M,N)}} [T_{\infty 2}^t] + E \frac{Au_{(M,N)}}{V_{(M,N)}} [T_{\infty 3}^t] \\ & + \left[ 1 - A \frac{Ad_{(M,N)}}{V_{(M,N)}} - B \frac{Al_{(M,N)}}{V_{(M,N)}} - D \frac{Ar_{(M,N)}}{V_{(M,N)}} - E \frac{Au_{(M,N)}}{V_{(M,N)}} \right] [T_{(M,N)}^t] = [T_{(M,N)}^{t+\Delta t}] \end{aligned} \quad (3.13)$$

Las ecuaciones 3.5 – 3.13 proporcionan la temperatura futura a partir de temperaturas en el tiempo presente. Sin embargo, los valores que arrojan pueden llegar a ser erróneos y violar la segunda ley de la termodinámica. Para evitar este inconveniente, existe el criterio de estabilidad. Este término como su nombre lo indica se encarga de que el método sea estable, es decir; que los errores generados en cualquier etapa de cálculo no sean amplificados, sino que sean atenuados conforme el cálculo avanza.

Todas estas ecuaciones nodales tienen un factor que multiplica a la temperatura del tiempo presente del nodo de interés. Este factor es el criterio de estabilidad y siempre debe ser igual o mayor a cero. El criterio es función de las distancias nodales, de las propiedades del sistema y del  $\Delta t$ .

Al tener 9 ecuaciones nodales, se tiene el mismo número de criterios de estabilidad diferentes. El criterio de estabilidad que se selecciona es el menor de todos para garantizar la estabilidad en todas las ecuaciones nodales. Por la geometría y discretización del sistema el criterio de estabilidad que cumple con esa condición es el del nodo (1,1).

$$\left[ 1 - A \frac{Au_{(1,1)}}{V_{(1,1)}} - B \frac{Ar_{(1,1)}}{V_{(1,1)}} - C \frac{Ad_{(1,1)}}{V_{(1,1)}} \right] \quad (3.14)$$

Debido a que lo primero que se lleva a cabo es la discretización, el único término que se puede variar es el  $\Delta t$ . Por tal motivo el valor mínimo permitido es el siguiente:

$$\Delta t \leq \left[ \frac{1}{\frac{\alpha A u_{(1,1)}}{\Delta z V_{(1,1)}} + \frac{\alpha A r_{(1,1)}}{\Delta r V_{(1,1)}} + \frac{h_{c1} A d_{(1,1)}}{\rho C p V_{(1,1)}}} \right] \quad (3.15)$$

La ecuación 3.15 es el criterio de estabilidad y los valores de las propiedades del sistema son las de estado sólido.

### **3.4 Algoritmo de Solución.**

Al tener bien definidos la discretización del sistema, las ecuaciones nodales y el criterio de estabilidad, lo que procede es la resolución del método numérico. Para ello se opta por la elaboración de un programa basado en el lenguaje de programación conocido como Dev-Pascal en su versión 1.9.2.

Los datos de entrada son las dimensiones del sistema (radio y longitud), el número de nodos, y las condiciones iniciales y de frontera del sistema ( $T_0$ ,  $T_\infty$  y  $h_c$ ).

Una vez que se han introducido estos datos, el programa calcula las áreas y volúmenes de cada nodo, posteriormente calcula el criterio de estabilidad y permite al usuario seleccionar el valor calculado o algún otro siempre y cuando cumpla la desigualdad de la ecuación 3.15. El último valor que solicita el programa es el tiempo final al que se desea conocer las temperaturas nodales.

Dependiendo de la temperatura inicial el programa procederá a calcular las temperaturas nodales utilizando las propiedades adecuadas al sistema (líquido, “mushy”, sólido). Al finalizar los cálculos de cada intervalo de tiempo, el programa

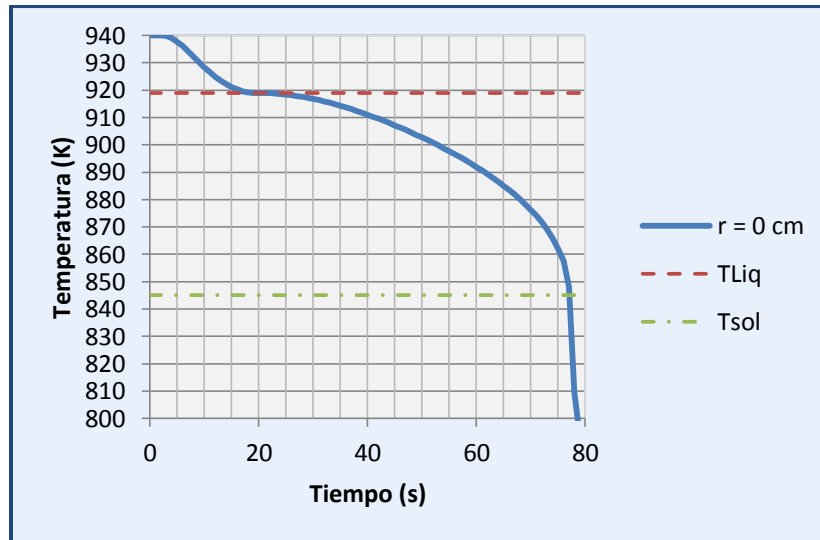
revisa si hay algún cambio de estado y realiza el ajuste de las propiedades pertinente.

Los datos de salida son los valores de la temperatura con respecto a la posición y del tiempo y son almacenados en un archivo de texto que posteriormente se manipula con ayuda de una hoja de cálculo de Excel.

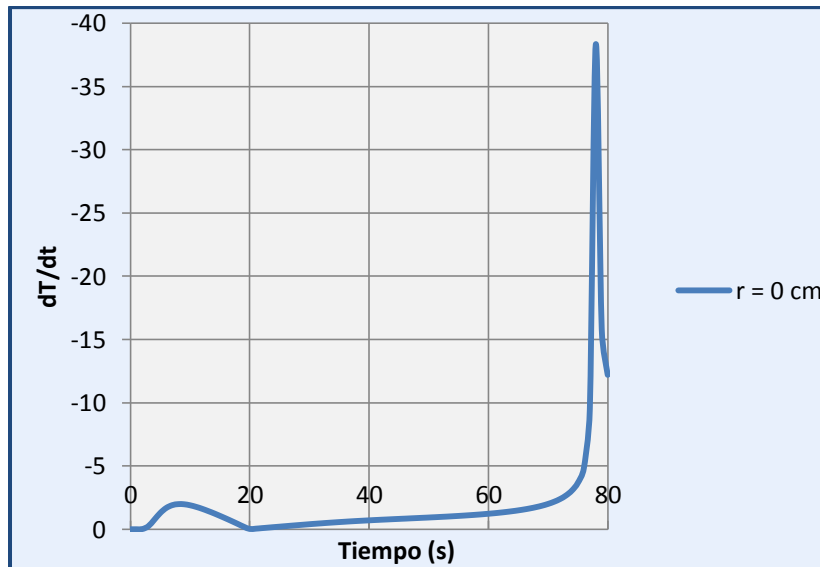
### ***3.5 Verificación del Modelo.***

A lo largo de todo el proceso de elaboración del modelo matemático que representa al sistema de solidificación unidireccional, el modelo fue verificado parte por parte y en conjunto. Entre las pruebas realizadas se encuentran las siguientes:

1. Se simularon condiciones de enfriamiento y de calentamiento en el sistema. Dichas simulaciones se llevaron a cabo en cada una de las direcciones (radial y axial).
2. Debido a la geometría del sistema, se comprobó que la respuesta obtenida al enfriar o calentar la parte superior fuera la misma que la obtenida, bajo las mismas condiciones, en la parte inferior.
3. Se obtuvieron curvas de enfriamiento a diferentes posiciones del sistema y se graficaron valores de rapidez de enfriamiento contra el tiempo y contra la temperatura. En las curvas de enfriamiento algunas veces no es muy claro el cambio de pendiente; al graficar la velocidad de enfriamiento contra el tiempo y contra la temperatura los cambios son más obvios. Dichas variaciones en la pendiente indican que el programa realiza el cambio de propiedades a la temperatura indicada.



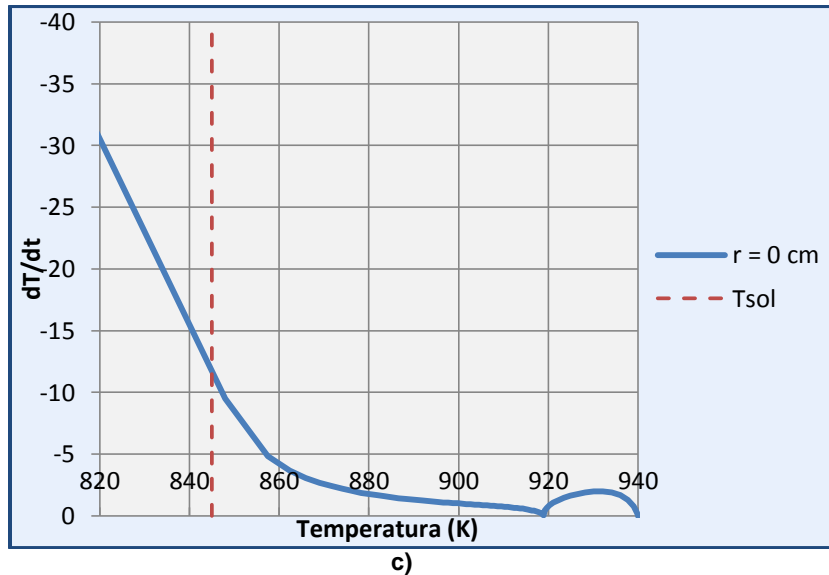
a)



b)

Figura 3.5. a) Curva de enfriamiento para el nodo central,  $r=0$ . b) Rapidez de enfriamiento contra tiempo, Condiciones de simulación:  $T_0=940K$ ,  $Z=0.2m$ ,  $r=0.05m$ , aislamiento en la parte superior e inferior,  $h_{c2} = 1000 W/m^2K$  y  $T_{\infty 2}=298 K$ .





**Figura 3.5. (continuación) c) Rapidez de enfriamiento contra temperatura. Condiciones de simulación:  $T_0=940\text{K}$ ,  $Z=0.2\text{m}$ ,  $r=0.05\text{m}$ , aislamiento en la parte superior e inferior,  $h_{c2} = 1000 \text{ W/m}^2\text{K}$  y  $T_{\infty 2}=298 \text{ K}$ .**

En la figura 3.5a se muestra la curva de enfriamiento perteneciente al centro de la pieza, al acercarse a la temperatura de solidus la temperatura decrece con mayor rapidez, incluso se podría decir que el cambio de pendiente se realiza un poco antes de la temperatura de solidus, sin embargo al analizar la figura 3.5b se observa claramente que la mayor rapidez de enfriamiento se alcanza después de haber superado la temperatura de solidus (78 s) y no antes. En la misma figura se aprecia como al inicio del proceso de solidificación, el centro de la pieza tarda unos segundos en ser afectado por las condiciones de enfriamiento; posteriormente libera el calor debido al sobrecalentamiento y al llegar a la temperatura de liquidus cambia nuevamente la rapidez de enfriamiento de manera significativa (20 s). La figura 3.5c presenta un comportamiento similar a la figura 3.5b, pero aparentemente no hay un cambio de pendiente muy marcado al cruzar la temperatura de solidus y esto se debe principalmente a la forma en que el programa almacena los datos. El programa puede calcular las temperaturas por centésima e incluso por milésima de segundo, pero almacena los resultados cada segundo. Al acercarse a la temperatura de solidus, se presentan cambios grandes de

temperatura en tiempos muy cortos, es decir la rapidez aumenta considerablemente y un segundo es mucho tiempo para registrar puntualmente estos cambios. Se realizaron simulaciones almacenando los resultados cada centésima de segundo y se obtuvieron gráficas en donde se observa claramente el cambio de pendiente relacionado a la temperatura de solidus.

Se analizaron nodos internos tanto en dirección axial y radial y se obtuvieron resultados similares a los presentados en la figura 3.5, aunque con una pequeña variación: las gráficas de rapidez de enfriamiento de los nodos internos no se presentan como una línea bien definida. Como estos nodos si tienen una aportación energética de sus nodos vecinos, esto se refleja en variaciones a lo largo de toda la gráfica, sin embargo los cambios de pendiente se conservan al igual que la tendencia.

4. Se evaluó la variación de la respuesta del modelo en función del número de nodos utilizado en los cálculos. Debido a que el método de solución del modelo es numérico, se sabe que se obtienen resultados más cercanos a la realidad entre mayor sea el número de nodos; sin embargo un mayor número de nodos implica un mayor tiempo de cálculo. Por tal motivo se registró el tiempo total de solidificación del sistema bajo ciertas condiciones. Se llevaron a cabo varias simulaciones variando la cantidad de nodos en la dirección axial y manteniendo fijo el número de nodos en la dirección radial el cual fue 10. Los resultados se muestran en la Fig.3.6. Una serie de simulaciones similares, pero variando los nodos en dirección radial y manteniendo fijo el valor en dirección axial, demostró que no hay variación significativa y esto tiene su origen en la relación  $L/R$  utilizada durante la simulación la cual fue igual a 4. Para relaciones menores es muy probable que si se presente una variación.

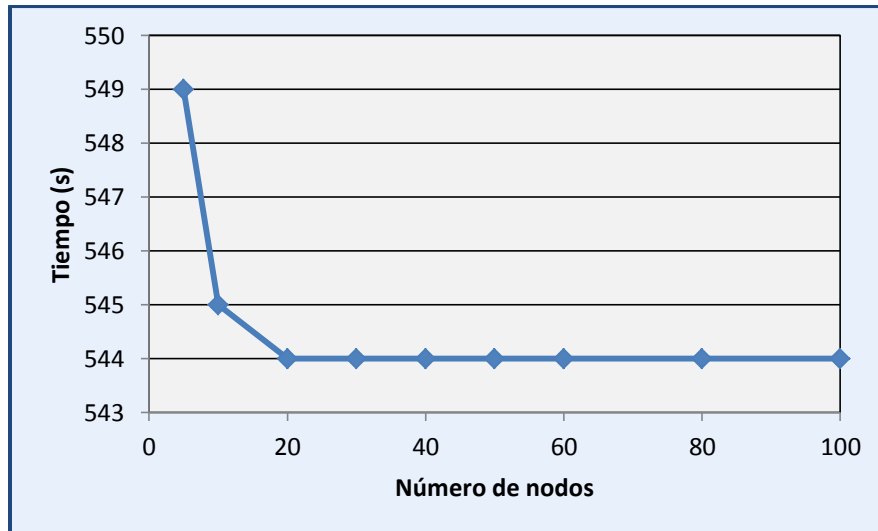


Figura 3.6. Representación gráfica de la variación del tiempo de solidificación completa del sistema con respecto al número de nodos empleado en los cálculos del programa. Condiciones de simulación:  $T_0=1019\text{K}$ ,  $Z=0.2\text{m}$ ,  $r=0.05\text{m}$ , aislamiento en la parte lateral y superior,  $h_{C1} = 10000 \text{ W/m}^2\text{K}$ ,  $T_{\infty 1}=298 \text{ K}$ , número de nodos en  $r=10$ .

### 3.6 Validación del Modelo.

En este punto el modelo ha demostrado que predice el comportamiento o tendencia del fenómeno físico, el siguiente paso es saber que tan apegado se encuentra a la realidad, para ello es necesario validar el modelo. Las formas más comunes para llevar esto a cabo son la experimentación o la comparación con otro modelo previamente validado. Debido a que el sistema Al-Cu4.5% es muy conocido y hay mucha información reportada sobre él, se decidió validar el modelo por la segunda opción.

El modelo propuesto en la referencia [13] fue empleado como punto de comparación. Existen diferencias entre el modelo propuesto por Clyne y el modelo del presente trabajo, las más significativas son la consideración de transporte de energía en una sola dirección (unidireccionalidad), el efecto de la solidificación de eutéctico y la forma de considerar la barrera al flujo de calor debida al molde.

En su trabajo, Clyne, muestra dos perfiles térmicos que fueron pronosticados por su modelo y se muestran en la parte superior de la figura 3.7. Se simularon pruebas con el modelo propuesto en este trabajo, bajo las mismas condiciones descritas por Clyne y se encontraron curvas con la misma tendencia pero a temperaturas más bajas, es decir el modelo a validar predice un enfriamiento más rápido. Como se mencionó anteriormente, existen diferencias entre los dos modelos y una de ellas es la forma cómo se considera la barrera al flujo de energía debida al molde. Clyne simula un acero, el cual es un material con baja conductividad térmica y además recubierto de pintura cerámica. El modelo empleado en este trabajo considera un material de alta conductividad térmica (cobre), de manera que la resistencia al flujo de calor sea casi cero. La manera de compensar la elevada resistencia considerada por Clyne es disminuir el valor del coeficiente convectivo al momento de simular con el modelo propio. Los resultados se presentan en la parte inferior de la figura 3.7.

Una vez que se disminuye el coeficiente de transferencia de calor por convección, se obtienen graficas no idénticas, pero sí muy parecidas.

Como segundo punto para validar el modelo se utilizó otra gráfica presentada en la referencia [13]. En ella se muestra la comparación del modelo desarrollado por Clyne contra resultados experimentales, fig. 3.8a. Al igual que para el caso anterior, la simulación con el modelo propio considero disminuir el coeficiente de transferencia por convección en la misma proporción; es decir, cerca de un 18% menos. Los resultados se muestran en la figura 3.8b.

Las gráficas nuevamente son muy parecidas aunque no idénticas. Y no podrían serlo porque aunque ambos modelos simulan el mismo fenómeno, las consideraciones que se tomaron al momento de su elaboración fueron diferentes. Para fines del presente trabajo las diferencias se consideran tolerables y se da por validado el modelo propuesto.

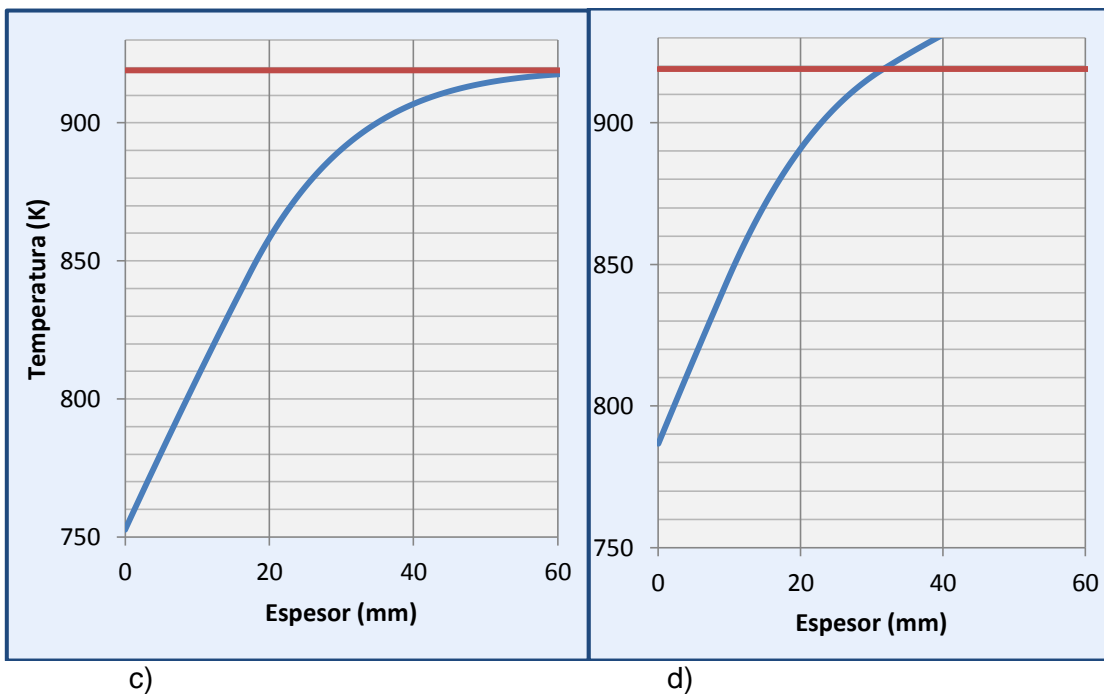
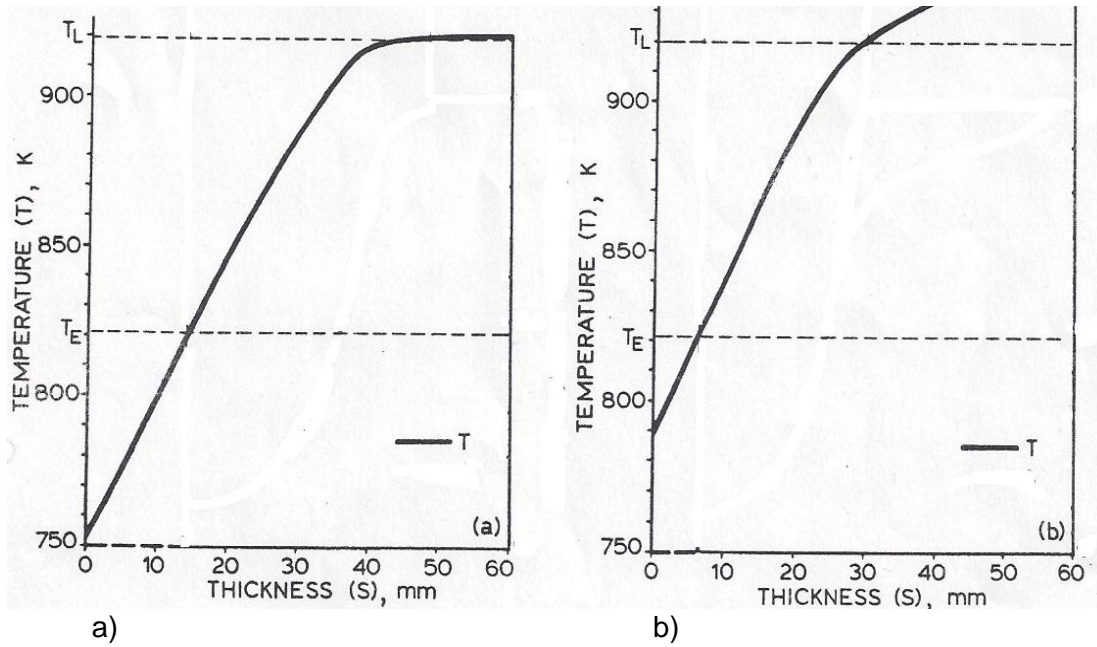
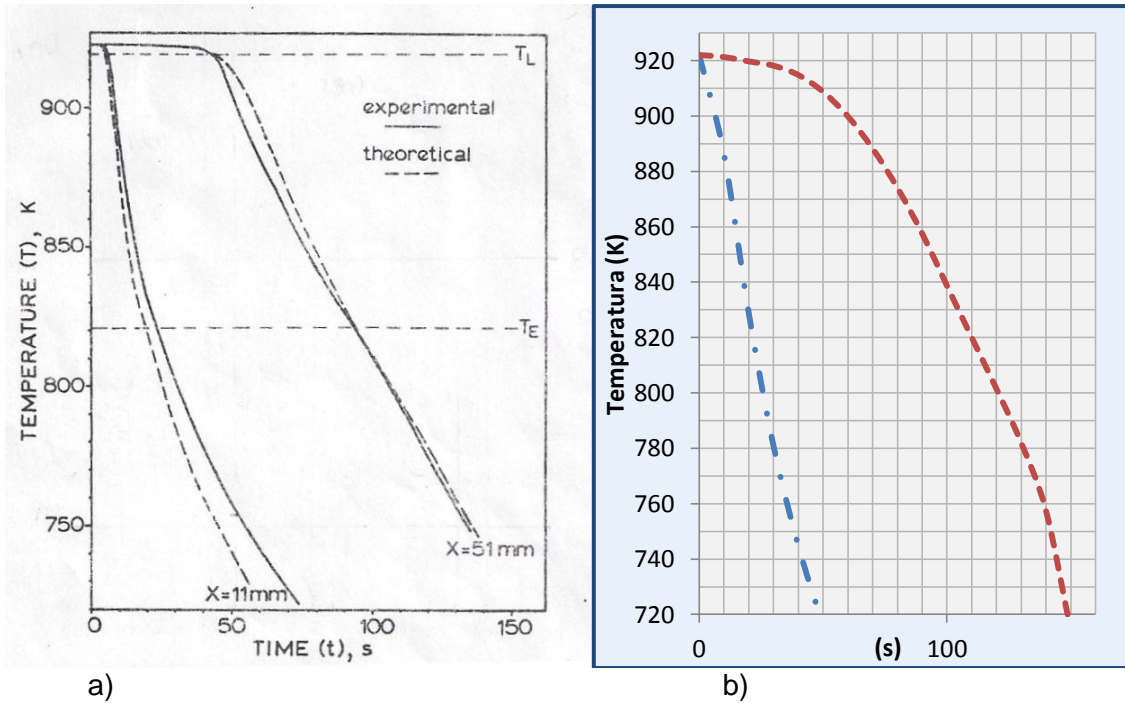


Figura 3.7 Perfiles térmicos simulados a lo largo de una barra de Al-Cu4.5% con una longitud de 80 mm después de 50 s, con  $h_c=2000 \text{ W/m}^2\text{K}$  con a) un sobrecalentamiento de 3 K y b) con un sobrecalentamiento de 100 K [13]. Perfiles térmicos simulados con ayuda del modelo propio y un  $h_c=1650 \text{ W/m}^2\text{K}$  para c) un sobrecalentamiento de 3 K y d) un sobrecalentamiento de 100 K.



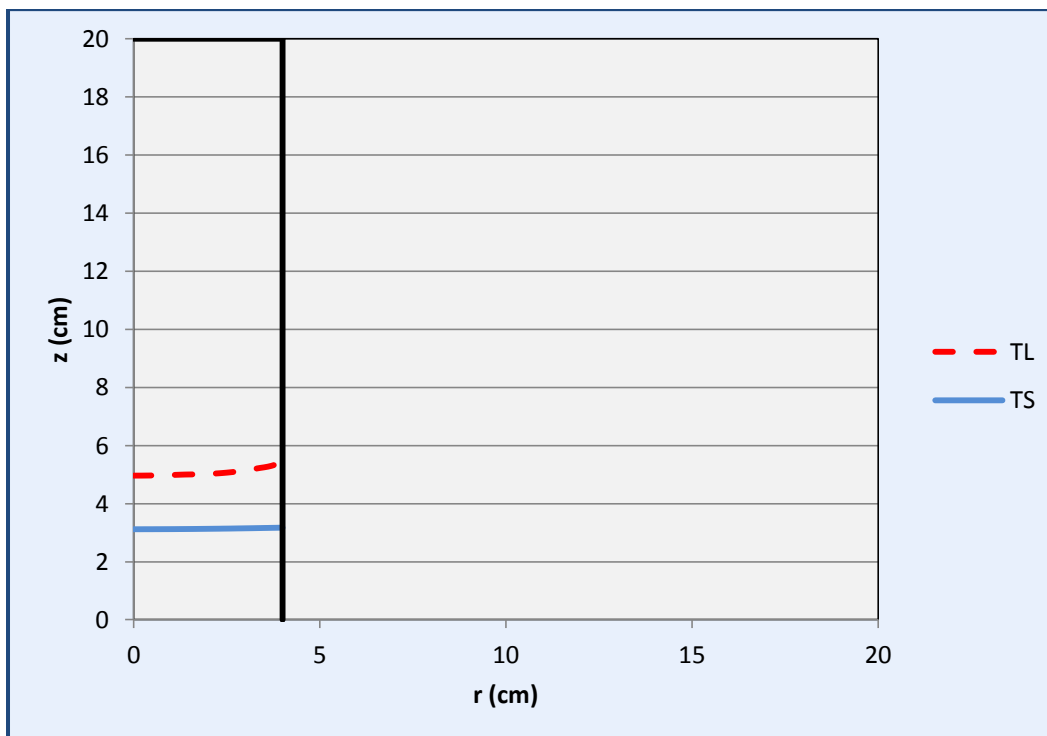
**Figura 3.8 a ) Comparación entre datos obtenidos con ayuda de termopares y predicciones a partir del modelo. Paredes del molde de acero pulido con un espesor de 1 mm, sobrecalentamiento de 3K y  $h_c=4400 \text{ W/m}^2\text{K}$  [13]. b) Predicciones del modelo propio. Longitud de 80 mm, sobrecalentamiento de 3K,  $h_c=3600 \text{ W/m}^2\text{K}$ . La línea de guiones y puntos representa la historia térmica del nodo colocado a  $z=11 \text{ mm}$ , la línea de guiones representa al nodo localizado a  $z=51 \text{ mm}$ .**

### **3.7 Pruebas de Simulación Preliminares.**

Una vez validado el modelo, se llevó a cabo una simulación con las condiciones presentadas en la tabla 3.3. Los resultados son mostrados en las figuras 3.9, 3.10 y 3.11. En las gráficas se puede observar cómo avanzan las temperaturas de liquidus y de solidus con respecto al tiempo. La primera de ellas es más sensible a las condiciones de enfriamiento laterales pero la línea de solidus no parecer ser afectada de manera muy significativa, de hecho, los cambios se vuelven más evidentes después de que el sistema ha solidificado la mitad de su longitud. En otras palabras, el sistema se comporta de manera unidireccional, al menos bajo las condiciones de simulación de la tabla 3.3.

**TABLA 3.3. Condiciones de simulación.**

$T_0$ (K)	$T_{\infty 1}$ (K)	$h_{c1}$ (W/m <sup>2</sup> K)	$h_{c2}$ (W/m <sup>2</sup> K)	$T_{\infty 2}$ (K)	$h_{c3}$ (W/m <sup>2</sup> K)	Relación L/R
969	298	8000	50	298	0	5



**Figura 3.9. Líneas de solidus y de liquidus en el interior de la probeta después de 30 segundos de haber iniciado el enfriamiento.**

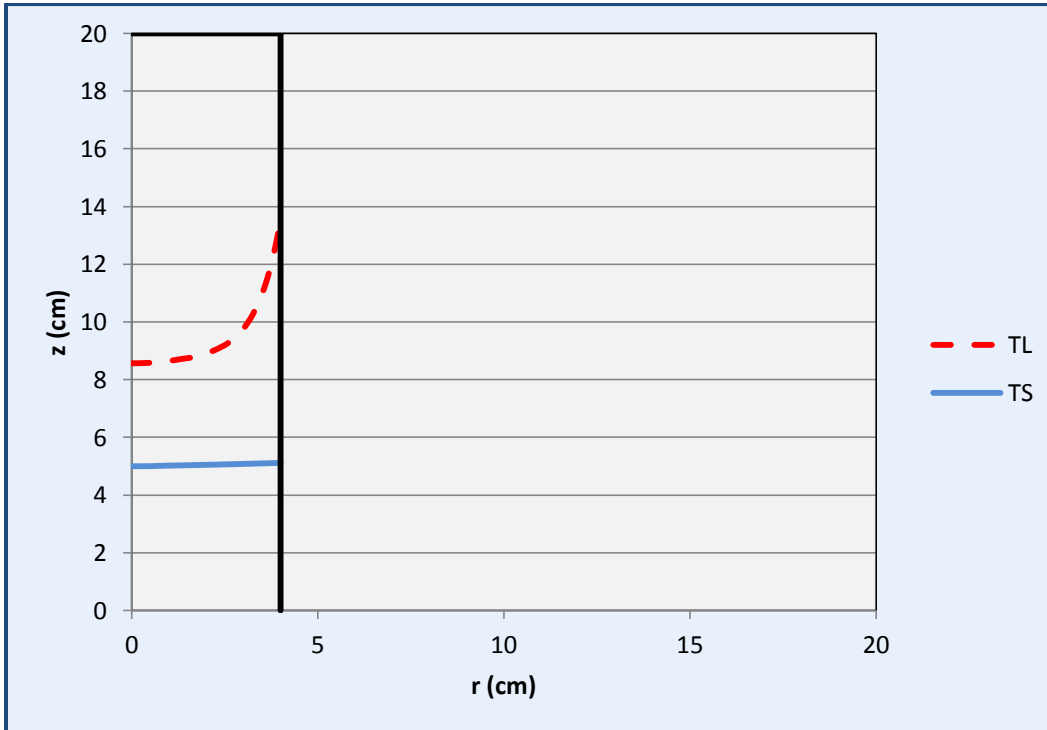


Figura. 3.10. Líneas de solidus y de líquidus en el interior de la probeta después de 1 minuto de haber iniciado el enfriamiento.

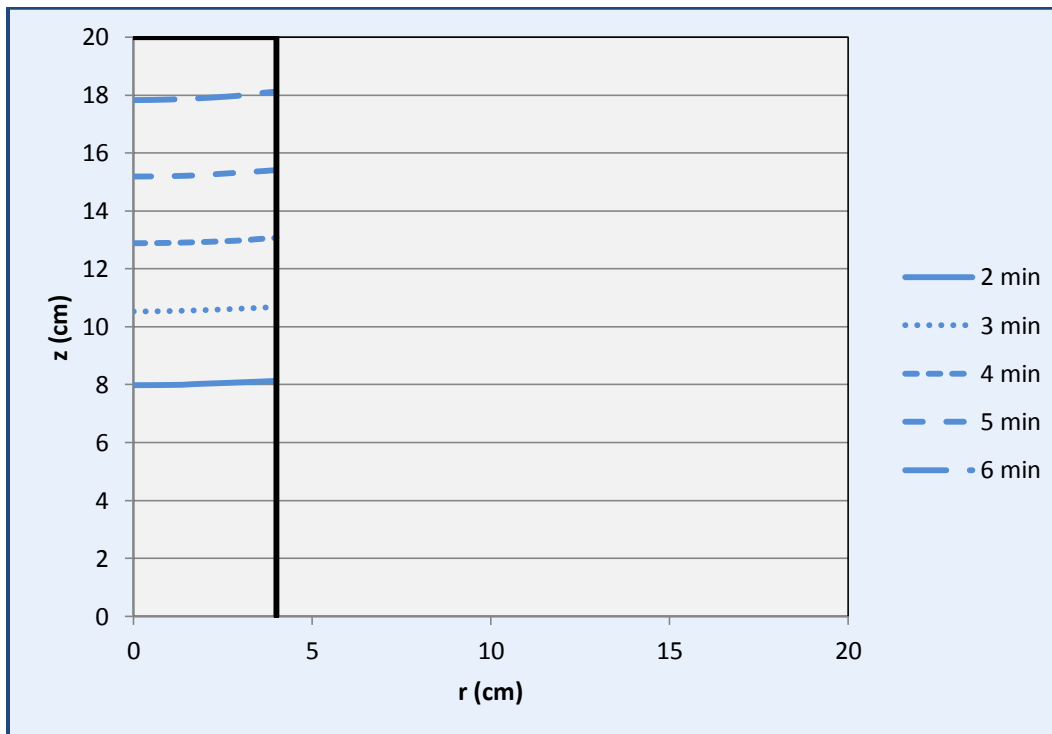


Figura. 3.11. Líneas de solidus en el interior de la probeta a diferentes tiempos después de haber iniciado el enfriamiento.



## CAPÍTULO 4 SIMULACIÓN

El modelo ha sido validado y probado, el siguiente paso es la elaboración del diseño del proceso de simulación. El diseño estadístico de experimentos, se lleva a cabo de acuerdo al diseño factorial completo  $2^k$ .

Las variables independientes o factores sometidos a análisis son:

1. La temperatura inicial de la aleación.
2. La temperatura del fluido con el que se lleva a cabo el enfriamiento del sistema.
3. El coeficiente de transferencia de calor convectivo en la parte inferior del sistema.
4. El coeficiente de transferencia convectivo en la parte lateral del sistema.
5. La relación de longitud-radio del sistema.

Todos los factores se analiza a dos niveles: un valor máximo y un valor mínimo, dichos valores representan el dominio experimental y todos son valores experimentales, es decir, se pueden reproducir en un laboratorio. Lo anterior queda resumido en la tabla 4.1.

**TABLA 4.1. Factores analizados y los valores de su dominio experimental.**

Factores	Dominio Experimental	
	( - )	( + )
$X_1$ : Temperatura inicial (K)	919	1019
$X_2$ : $T_{\infty 1}$ (K)	298	323
$X_3$ : $h_{c1}$ (W/m <sup>2</sup> K)	100	10000
$X_4$ : $h_{c2}$ (W/m <sup>2</sup> K)	9	36
$X_5$ : Relación L/R	5	16

La matriz de corridas queda definida por el número de factores que se analizan; en éste trabajo son 5, por lo tanto el número total de corridas a simular son:  $2^5$ . La tabla 4.3 muestra la matriz de corridas completa con su respectivo plan de ejecución. Cada fila en la matriz de corridas representa una corrida y cada columna es un factor analizado.

El número de nodos empleados en la simulación se mantiene constante y es igual a 81 en dirección axial y 21 en dirección radial para un total de 1701.

En la matriz de experimentos no se menciona el valor de  $h_{C3}$  pero es el mismo en todos los experimentos,  $9 \text{ W/m}^2\text{K}$ ; por su parte la  $T_{\infty 2}$  al igual que  $T_{\infty 3}$  es igual a 298 K.

Las dimensiones usadas para la relación L/R se muestran en la tabla 4.2.

**TABLA 4.2. Dimensiones del sistema empleadas para la relación L/R.**

<b>Relación L/R</b>	<b>5</b>	<b>16</b>
Longitud (cm)	20	20
Radio (cm)	4	1.25

Las representaciones gráficas muestran las variaciones en la línea de solidus y por lo tanto proporcionan una visión cualitativa de la unidireccionalidad del sistema pero para propósitos de análisis se requiere un valor numérico y éste se obtiene calculando la diferencia de posición de la isoterma de solidus tomando dos puntos de referencia: una posición fija en el centro y la superficie del sistema. En la figura 3.11 se observa que la línea de solidus presenta mayores variaciones en la segunda mitad del sistema, por lo tanto el análisis se lleva a cabo en tres diferentes puntos de dicha parte. El primer punto se ubicará justo a la mitad de la longitud del sistema, a 10 cm; el segundo punto se encontrará a 15 cm y por último se analizará el sistema a 17.5 cm.

Además de la diferencia de posición de la temperatura solidus entre el centro y el exterior del sistema, se cuantifica el tiempo local de solidificación en los tres puntos antes mencionados.

**TABLA 4.3. Matriz de corridas.**

Matriz de corridas						Condiciones de corridas				
	$X_1$	$X_2$	$X_3$	$X_4$	$X_5$	$T_0$	$T_\infty$	$h_{c1}$	$h_{c2}$	L/R
1	-	-	-	-	-	919	298	100	9	5
2	+	-	-	-	-	1019	298	100	9	5
3	-	+	-	-	-	919	323	100	9	5
4	+	+	-	-	-	1019	323	100	9	5
5	-	-	+	-	-	919	298	10000	9	5
6	+	-	+	-	-	1019	298	10000	9	5
7	-	+	+	-	-	919	323	10000	9	5
8	+	+	+	-	-	1019	323	10000	9	5
9	-	-	-	+	-	919	298	100	36	5
10	+	-	-	+	-	1019	298	100	36	5
11	-	+	-	+	-	919	323	100	36	5
12	+	+	-	+	-	1019	323	100	36	5
13	-	-	+	+	-	919	298	10000	36	5
14	+	-	+	+	-	1019	298	10000	36	5
15	-	+	+	+	-	919	323	10000	36	5
16	+	+	+	+	-	1019	323	10000	36	5
17	-	-	-	-	+	919	298	100	9	16
18	+	-	-	-	+	1019	298	100	9	16
19	-	+	-	-	+	919	323	100	9	16
20	+	+	-	-	+	1019	323	100	9	16
21	-	-	+	-	+	919	298	10000	9	16
22	+	-	+	-	+	1019	298	10000	9	16
23	-	+	+	-	+	919	323	10000	9	16
24	+	+	+	-	+	1019	323	10000	9	16
25	-	-	-	+	+	919	298	100	36	16
26	+	-	-	+	+	1019	298	100	36	16
27	-	+	-	+	+	919	323	100	36	16
28	+	+	-	+	+	1019	323	100	36	16
29	-	-	+	+	+	919	298	10000	36	16
30	+	-	+	+	+	1019	298	10000	36	16
31	-	+	+	+	+	919	323	10000	36	16
32	+	+	+	+	+	1019	323	10000	36	16

## CAPÍTULO 5 RESULTADOS Y DISCUSIÓN

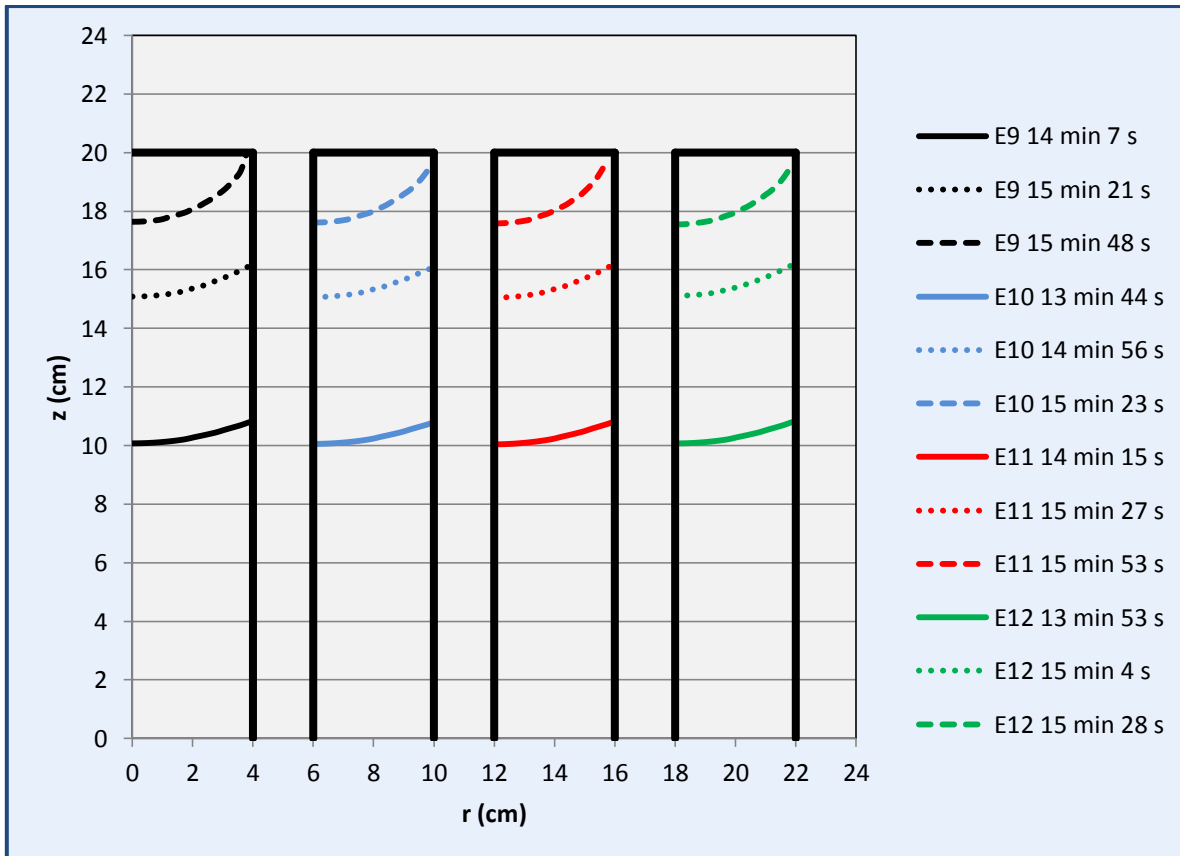
La tabla 5.1 muestra los valores de los resultados obtenidos al ejecutar la matriz de corridas.

**TABLA 5.1. Matriz de corridas junto con el plan de ejecución y las dos respuestas evaluadas (tiempo local de solidificación y diferencia de posición de la temperatura solidus entre el nodo exterior y el nodo interior) en tres posiciones diferentes del sistema.  
(\*Valores tomados en la parte interior del sistema, debido a la naturaleza de la línea solidus.**

	Matriz de Corridas					Condiciones de corridas					Respuesta	
	X <sub>1</sub>	X <sub>2</sub>	X <sub>3</sub>	X <sub>4</sub>	X <sub>5</sub>	T <sub>0</sub>	T <sub>∞</sub>	h <sub>c1</sub>	h <sub>c2</sub>	L/R	TLS (s)	ΔZ (cm)
E1	-	-	-	-	-	919	298	100	9	5	2017	0.213
											2202	0.284
											2258	0.424
E2	+	-	-	-	1019	298	100	9	5	1943	0.213	
										2119	0.282	
										2175	0.419	
E3	-	+	-	-	919	323	100	9	5	2062	0.222	
										2243	0.295	
										2298	0.431	
E4	+	+	-	-	1019	323	100	9	5	1990	0.221	
										2163	0.294	
										2218	0.430	
E5	-	-	+	-	919	298	10000	9	5	160	0.027	
										327	0.054	
										409	0.055	
E6	+	-	+	-	1019	298	10000	9	5	82	0.026	
										177	0.038	
										240	0.052	
E7	-	+	+	-	919	323	10000	9	5	166	0.037	
										340	0.042	
										423	0.054	
E8	+	+	+	-	1019	323	10000	9	5	87	0.035	
										186	0.042	
										252	0.058	
E9	-	-	-	+	919	298	100	36	5	847	0.763	
										921	1.099	
										948	1.747*	
E10	+	-	-	+	1019	298	100	36	5	824	0.737	
										896	1.039	
										923	1.790*	
E11	-	+	-	+	919	323	100	36	5	855	0.786	
										927	1.151	
										953	1.875*	
E12	+	+	-	+	1019	323	100	36	5	833	0.770	
										904	1.103	
										928	1.915	
E13	-	-	+	+	919	298	10000	36	5	147	0.107	
										279	0.145	
										342	0.192	
E14	+	-	+	+	1019	298	10000	36	5	79	0.104	
										182	0.140	
										243	0.192	
E15	-	+	+	+	919	323	10000	36	5	153	0.106	
										287	0.153	
										351	0.196	

**TABLA 5.1. (Continuación)**

E16	+	+	+	+	-	1019	323	10000	36	5	84	0.103
											191	0.143
											253	0.192
E17	-	-	-	-	+	919	298	100	9	16	994	0.051
											1086	0.056
											1117	0.066
E18	+	-	-	-	+	1019	298	100	9	16	973	0.047
											1060	0.056
											1092	0.065
E19	-	+	-	-	+	919	323	100	9	16	1006	0.050
											1095	0.058
											1125	0.069
E20	+	+	-	-	+	1019	323	100	9	16	985	0.049
											1071	0.055
											1100	0.078
E21	-	-	+	-	+	919	298	10000	9	16	155	0.007
											294	0.012
											360	0.013
E22	+	-	+	-	+	1019	298	10000	9	16	80	0.010
											185	0.010
											251	0.013
E23	-	+	+	-	+	919	323	10000	9	16	161	0.007
											304	0.010
											370	0.013
E24	+	+	+	-	+	1019	323	10000	9	16	84	0.008
											194	0.011
											262	0.014
E25	-	-	-	+	+	919	298	100	36	16	326	0.250
											341	0.600*
											340	-1.301*
E26	+	-	-	+	+	1019	298	100	36	16	320	0.171
											338	0.760*
											339	-0.266*
E27	-	+	-	+	+	919	323	100	36	16	327	0.257
											341	0.465*
											340	-1.556*
E28	+	+	-	+	+	1019	323	100	36	16	322	0.235
											338	0.781*
											339	-0.515*
E29	-	-	+	+	+	919	298	10000	36	16	123	0.028
											199	0.041
											231	0.049
E30	+	-	+	+	+	1019	298	10000	36	16	89	0.028
											169	0.044
											205	0.049
E31	-	+	+	+	+	919	323	10000	36	16	126	0.029
											202	0.043
											234	0.051
E32	+	+	+	+	+	1019	323	10000	36	16	92	0.028
											173	0.044
											209	0.049

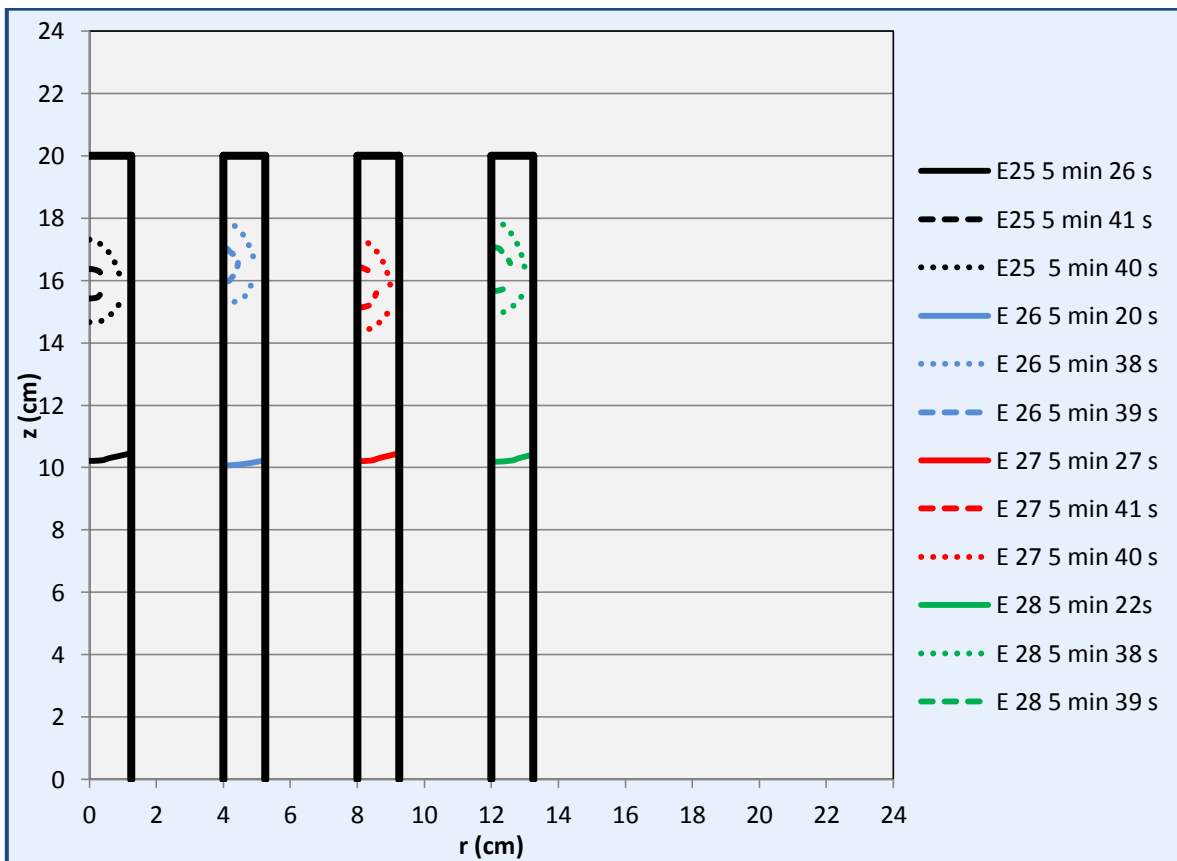


**Figura 5.1. Avance de la temperatura solidus a través del sistema junto con los tiempos locales de solidificación. De izquierda a derecha son: E9, E10, E11 y E12.**

De las dos respuestas mostradas en la tabla 5.1 se puede observar que el tiempo local de solidificación es mucho más sensible a los cambios en las variables. Por su parte la posición de la temperatura solidus también presenta variaciones, aunque son menos notorias, no dejan de tener su repercusión a nivel microestructural; mientras que en el tiempo local de solidificación las variaciones comprenden decenas de minutos, en el caso de la posición de la temperatura de solidus, las variaciones oscilan entre decimas de milímetro y milímetros, salvo 8 corridas en las que las diferencias alcanzan el orden de cm.

En la figura 5.1 se muestra las primeras cuatro corridas en donde se presenta el mayor desvío de la unidireccionalidad, estas corridas tiene como particularidad que los coeficientes de transferencia de calor convectivo son del mismo orden de magnitud ( $hc_1 = 100 \text{ W/m}^2\text{K}$  y  $hc_2 = 36 \text{ W/m}^2\text{K}$ ); la relación de  $hc_1/hc_2$ , con un valor de 2.7, es la menor de las cuatro que se emplearon en el plan de simulación. Éste

hecho, junto con el elevado valor de la difusividad térmica de la aleación de aluminio, explican las variaciones de la isoterma de solidus a través del sistema. En otras palabras, la aleación responde rápidamente a los cambios térmicos a su alrededor, cuando estos se deben a un fenómeno de enfriamiento, el flujo de calor seguirá la dirección del enfriamiento más severo. En las corridas de la fig. 5.1 la energía tiene dos posibles caminos para fluir; en gran medida lo hace por la parte inferior pero hay una parte significativa de ella que fluye en dirección radial y por tal motivo se distorsiona el perfil de la temperatura solidus.



**Figura 5.2. Avance de la temperatura solidus a través del sistema junto con los tiempos locales de solidificación. De izquierda a derecha son: E25, E26, E27 y E28.**

Cuando uno de los coeficientes es muy grande con respecto al otro, el calor fluirá en dirección del coeficiente más grande, e ignorará casi por completo el efecto del segundo coeficiente, tal condición se cumple en la mayoría de las corridas y por tal motivo la unidireccionalidad se mantiene estable en todas ellas.

Las otras 4 corridas que presentaron variación en la unidireccionalidad se muestran en la fig. 5.2 y corresponden a las mismas condiciones de simulación que los mostrados en la fig. 5.1, con la excepción de la relación  $L/R$ , la cual es mayor en la segunda figura.

Debido a las condiciones de simulación, las corridas mostradas en la figura 5.2 no terminan de solidificar en la parte superior sino a una altura ubicada entre 16 y 17 cm. Hay que recordar que el sistema no se encuentra totalmente aislado en la parte superior, todas las corridas se simularon con un valor convectivo de  $9 \text{ W/m}^2\text{K}$ . Además se suma el efecto de la relación  $L/R$ . En éste caso al igual que en las corridas mostradas en la figura 5.1, la relación  $hc_1/hc_2$  y las propiedades termofísicas de la aleación tienen mucho que ver con tal comportamiento. Al tener un radio más pequeño, el sistema contiene menos aleación y por lo tanto menos energía que disipar, y en este caso la cantidad de calor que se disipa por la parte superior sí afecta al proceso de solidificación.

En las 28 corridas restantes se aprecia una tendencia a aumentar ligeramente la curvatura de la temperatura de solidus conforme la solidificación gana altura en el sistema. Lo anterior se debe a que en la medida que el espesor de material solidificado crece, éste se convierte en una barrera para el flujo de calor y por tal motivo una parte del calor tenderá a fluir en mayor proporción en dirección radial, sin embargo la cantidad de calor es muy pequeña en comparación al calor que fluye en dirección axial. Numéricamente se puede observar en la tabla 5.1, pero gráficamente es imperceptible, con excepción de las corridas mostradas en las figuras 5.1 y 5.2.

Con base a lo anterior se puede decir que la unidireccionalidad se mantiene por arriba de los 18 cm de altura en el 75% de las corridas simuladas.



Como se mencionó con anterioridad, el tiempo local de solidificación es más sensible al cambio de las variables propuesto en el plan de simulación. El valor de esta respuesta se relaciona directamente con la forma en que se extrae energía del sistema. Bajo condiciones de enfriamiento severas, el tiempo local de solidificación disminuirá. Dichas condiciones dependen de manera directa, al igual que la unidireccionalidad, de los coeficientes convectivos y de la relación L/R. Con un coeficiente convectivo mayor y una relación L/R menor se obtienen los tiempos locales más bajos. También influyen el sobrecalentamiento y la temperatura del fluido con el que se enfría al sistema. Tiempos locales muy grandes no son muy recomendables porque dan origen a defectos como la microsegregación y microgrietas.

De las primeras 16 corridas, es decir donde se mantiene una relación L/R igual a 5, la corrida que reportó un menor tiempo local fue E6. Los resultados de ésta corrida son muy parecidos a los obtenidos en E14. Al observar las variables empleadas en la simulación de estas dos corridas, se encuentra que la única diferencia es el valor del coeficiente convectivo  $hc_2$ . En E6 el valor del coeficiente es el menor,  $9 \text{ W/m}^2\text{K}$ ; por su parte en E14 el valor es el máximo,  $36 \text{ W/m}^2\text{K}$ . Se podría llegar a pensar que E14 tendría un valor de tiempo local menor a E6 debido al coeficiente mayor, sin embargo no es así. La diferencia entre E6 y E14 es de solo unos cuantos segundos, pero al analizar la unidireccionalidad se observa el efecto de  $hc_2$ . En E14 es mucho mayor la curvatura de la línea solidus que en E6. Bajo estas condiciones de L/R, el coeficiente convectivo lateral tiene mayor efecto en la unidireccionalidad que en el tiempo local de solidificación.

En las siguientes 16 corridas, es decir donde se mantiene una relación de L/R igual a 16, el menor tiempo local se obtuvo en el experimento E30. En este caso el coeficiente lateral si tiene un efecto en el tiempo local de solidificación y en la unidireccionalidad.

Haciendo uso del número de Biot, se puede ver que en dirección axial se presentan gradientes térmicos dentro del sistema, por el contrario, en dirección radial, bajo las condiciones analizadas en el presente trabajo, no existe resistencia a la conducción dentro del sistema y por lo tanto no hay gradientes térmicos significativos lo cual favorece la unidireccionalidad, ver apéndice A.4. Las corridas donde se muestra favorecida la unidireccionalidad son aquellas en las que la relación de Biot axial y radial es  $\geq 111.5$ . Para relaciones menores a este valor, el sistema presenta un comportamiento bidireccional.

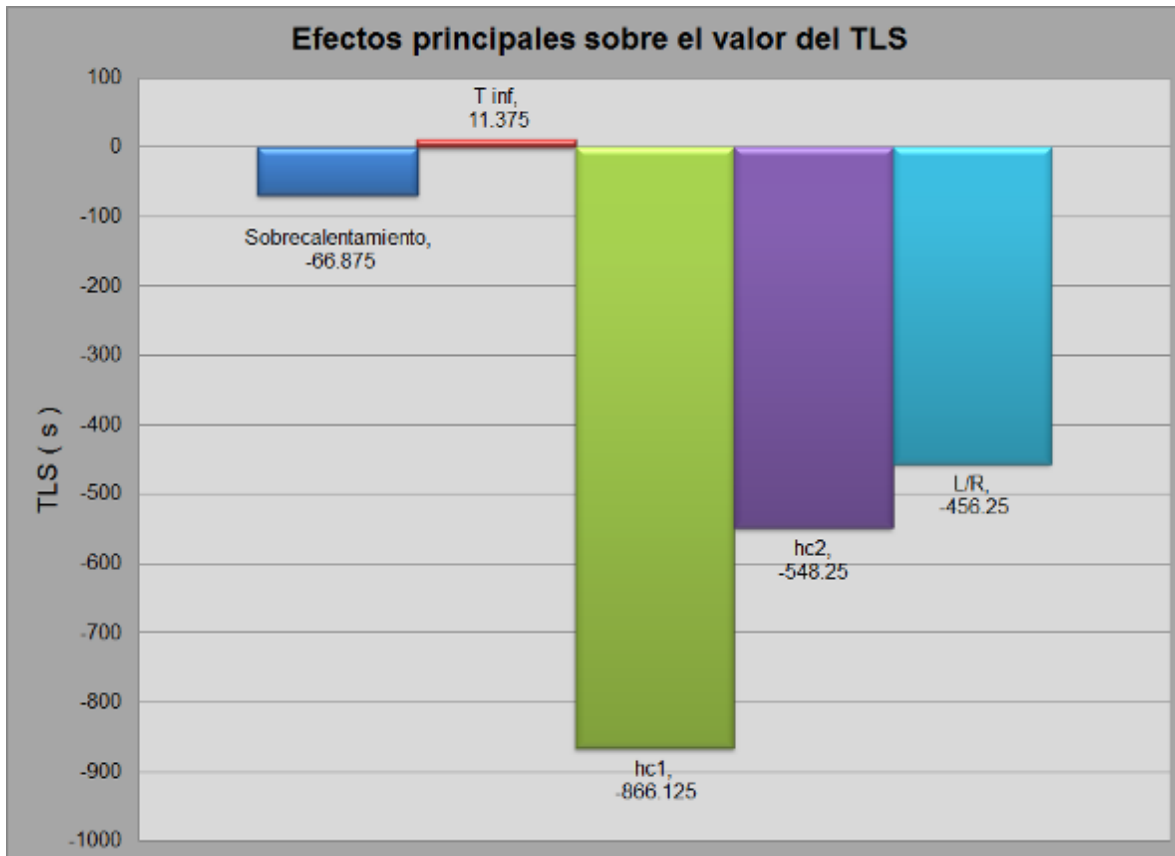
Ya se ha visto el efecto cualitativo que tienen algunas variables en la unidireccionalidad y en el tiempo local de solidificación del sistema, pero es necesario conocer el efecto cuantitativo de las variables. El diseño experimental usado en este trabajo, cuenta con su propio análisis estadístico de las respuestas. Se pueden generar tantos efectos de las variables como corridas realizadas. Todas las respuestas obtenidas mediante la simulación se consideraron positivas. Para el tiempo local de solidificación es obvio que no hay tiempos negativos, pero para el caso de la diferencia de posición de la línea solidus, existen cuatro corridas, ver fig.5.2, donde el avance de la solidificación se realizó por la parte superior, lo cual provocó que el valor de la diferencia de posición fuera negativa. El propósito del análisis estadístico se centra en conocer la variación de la unidireccionalidad, por tal motivo, y aunado al hecho de que este comportamiento solo se presentó en cuatro de las corridas, los valores empleados para el análisis, fueron valores absolutos. La tabla 5.2 muestra el valor de estos efectos.

El primer efecto es un valor promedio de las respuestas. Este valor aumenta para las dos respuestas analizadas, el tiempo local de solidificación y la diferencia de posición de la línea solidus, conforme la solidificación avanza en dirección axial. En otras palabras la unidireccionalidad siempre se vuelve menos estable conforme la línea solidus gana altura o penetración en el sistema.

**TABLA 5.2. Valor de los 32 efectos obtenidos en la simulación experimental. El TLS se muestra en segundos y  $\Delta Z$  en cm.**

Efecto	Z= 10cm		Z= 15 cm		Z= 17.5 cm	
	TLS	$\Delta Z$	TLS	$\Delta Z$	TLS	$\Delta Z$
<b>1 Promedio</b>	577.875	0.179	679.188	0.292	722.750	0.433
<b>2 <math>b_{T_0}</math></b>	-47.375	-0.010	-65.125	0.021	-66.875	-0.125
<b>3 <math>b_{T_\infty}</math></b>	10.875	0.010	11.5	0.002	11.375	0.050
<b>4 <math>b_{hc1}</math></b>	-922.250	-0.272	-897.250	-0.463	-866.125	-0.732
<b>5 <math>b_{hc2}</math></b>	-462.375	0.205	-522.375	0.385	-548.250	0.605
<b>6 <math>b_{L/R}</math></b>	-385.375	-0.201	-434.625	-0.204	-456.250	-0.366
<b>7 <math>b_{T_0 \times T_\infty}</math></b>	0	0.004	0.250	0.011	0.250	0
<b>8 <math>b_{T_0 \times hc1}</math></b>	-16.875	0.009	-31.750	-0.024	-33.750	0.124
<b>9 <math>b_{T_0 \times hc2}</math></b>	14.750	-0.009	26.875	0.024	29.375	-0.125
<b>10 <math>b_{T_0 \times L/R}</math></b>	13.250	-0.003	23.375	0.039	26.875	-0.134
<b>11 <math>b_{T_\infty \times hc1}</math></b>	-6.125	-0.008	-3.375	-0.001	-2.250	-0.049
<b>12 <math>b_{T_\infty \times hc2}</math></b>	-6.250	-0.006	-6.750	0	-6.875	0.045
<b>13 <math>b_{T_\infty \times L/R}</math></b>	-5.500	-0.001	-5.750	-0.016	-5.875	0.015
<b>14 <math>b_{hc1 \times hc2}</math></b>	452.125	-0.158	481.750	-0.318	485.875	-0.518
<b>15 <math>b_{hc1 \times L/R}</math></b>	379.375	0.151	403.5	0.136	407.375	0.273
<b>16 <math>b_{hc2 \times L/R}</math></b>	123.250	-0.105	123.875	-0.071	118.250	-0.167
<b>17 <math>b_{T_0 \times T_\infty \times hc1}</math></b>	-0.5	-0.005	-0.625	-0.010	-0.125	0
<b>18 <math>b_{T_0 \times T_\infty \times hc2}</math></b>	0.125	0.004	0.250	0.009	0	-0.002
<b>19 <math>b_{T_0 \times T_\infty \times L/R}</math></b>	-0.125	0.003	0	0.008	0	0
<b>20 <math>b_{T_0 \times hc1 \times hc2}</math></b>	-1.750	0.008	7	-0.023	9.250	0.124
<b>21 <math>b_{T_0 \times hc1 \times L/R}</math></b>	-4	0.005	4	-0.034	6.750	0.134
<b>22 <math>b_{T_0 \times hc2 \times L/R}</math></b>	-0.375	-0.004	-1.375	0.037	-2.625	-0.136
<b>23 <math>b_{T_\infty \times hc1 \times hc2}</math></b>	5.750	-0.008	4.625	0.003	4.250	0.045
<b>24 <math>b_{T_\infty \times hc1 \times L/R}</math></b>	4.750	-0.001	4.125	0.016	3.750	-0.016
<b>25 <math>b_{T_\infty \times hc2 \times L/R}</math></b>	3.125	0.003	2.750	-0.014	3.125	0.016
<b>26 <math>b_{hc1 \times hc2 \times L/R}</math></b>	-125.5	0.079	-141.750	0.036	-146.875	0.116
<b>27 <math>b_{T_0 \times T_\infty \times hc1 \times hc2}</math></b>	0.125	-0.004	0.625	-0.012	0.375	0.001
<b>28 <math>b_{T_0 \times T_\infty \times hc1 \times L/R}</math></b>	0.125	-0.003	0.375	-0.009	0.375	0
<b>29 <math>b_{T_0 \times T_\infty \times hc2 \times L/R}</math></b>	0.250	0.003	-0.250	0.010	0	0
<b>30 <math>b_{T_0 \times hc1 \times hc2 \times L/R}</math></b>	8.375	0.003	7.5	-0.036	5.5	0.136
<b>31 <math>b_{T_\infty \times hc1 \times hc2 \times L/R}</math></b>	-3.625	0	-3.625	0.012	-4	-0.016
<b>32 <math>b_{T_0 \times T_\infty \times hc1 \times hc2 \times L/R}</math></b>	0	-0.003	-0.125	-0.008	-0.375	0.001

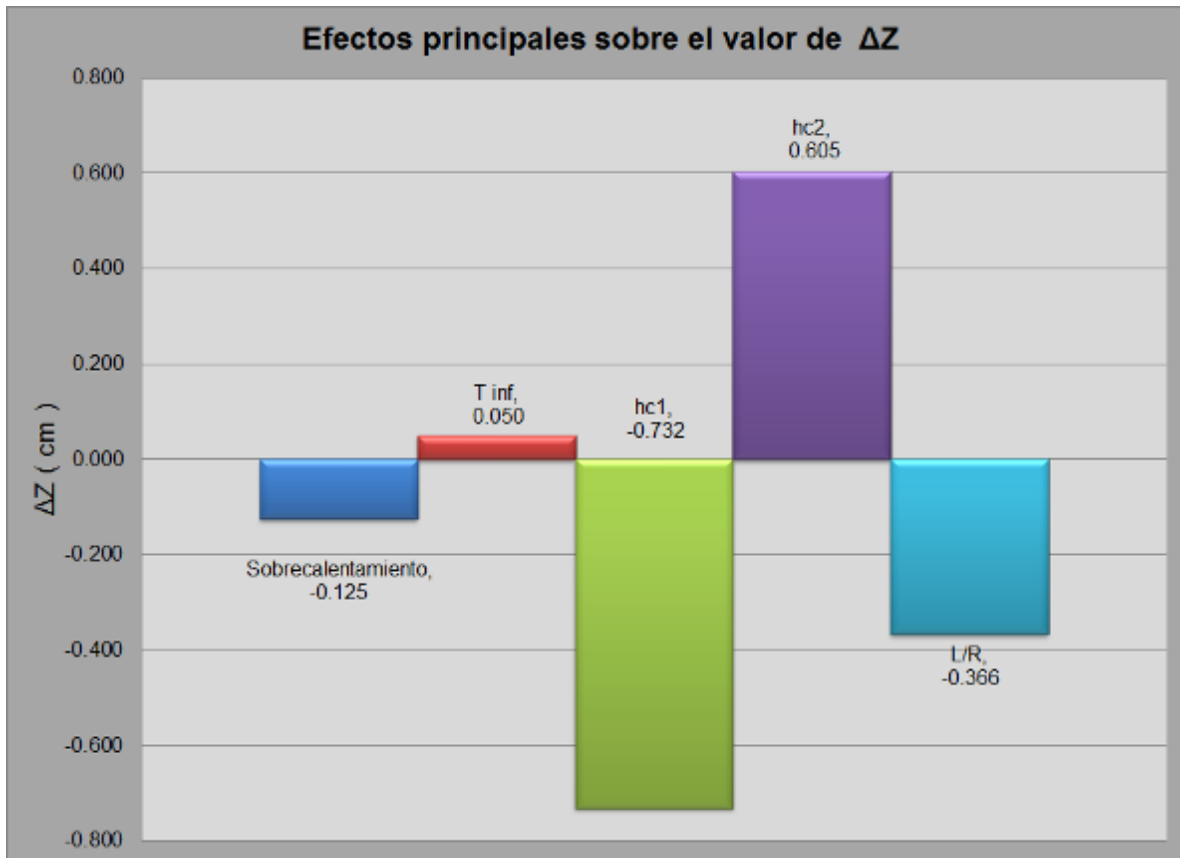
Los siguientes 5 efectos corresponden a los efectos principales de cada una de las variables analizadas e indican la variación promedio de las respuestas cuando cambia dicha variable. En las figuras 5.3 y 5.4 se muestran gráficamente el valor de cada efecto principal en cada una de las dos respuestas analizadas.



**Fig. 5.3. Valores de los efectos principales sobre la respuesta del TLS**

El efecto de aumentar la temperatura inicial del sistema es disminuir (signo negativo) el valor de las dos respuestas, es decir, favorece una solidificación más rápida y la unidireccionalidad. A mayor sobrecalentamiento, el sistema cuenta con más energía, el cual al comenzar el enfriamiento origina un mayor gradiente térmico y por lo tanto un mayor flujo de calor que se refleja en la disminución de las dos respuestas analizadas.

El siguiente efecto es el provocado por el aumento de la temperatura del fluido con el que se enfría al sistema. A diferencia de la variable anterior, la temperatura del fluido aumenta el tiempo local de solidificación aunque su efecto es menor que el provocado por el sobrecalentamiento. En cuanto a la unidireccionalidad, se puede observar que la disminuye en la primera mitad y al final del sistema; aunque esto último se podría deber más a la lejanía de la fuente de enfriamiento que al propio aumento de la  $T_{\infty}$ .



**Fig. 5.4. Valores de los efectos principales sobre la respuesta  $\Delta Z$**

El coeficiente convectivo inferior  $hc_1$  es la variable que tiene un mayor efecto en la disminución del tiempo local de solidificación, su influencia decrece ligeramente a distancias alejadas de la base del sistema. Favorece la unidireccionalidad casi 6 veces más que el sobrecalentamiento.

El coeficiente convectivo lateral  $hc_2$ , disminuye el tiempo local de solidificación pero también afecta la unidireccionalidad en forma negativa y lo hace en mayor proporción que cualquier otra de las demás variables. Su efecto se ve aumentado por el valor que tenga el coeficiente  $hc_1$  y la geometría del sistema.

La relación  $L/R$  disminuye el tiempo local de solidificación y su efecto a diferencia del sobrecalentamiento y el coeficiente convectivo  $hc_1$ , aumenta al incrementarse la altura solidificada del sistema. En cuanto a la unidireccionalidad su efecto es a

favor; debido a su magnitud es el tercero en importancia en cuanto a ésta respuesta se refiere.

Un valor de la relación  $L/R$  pequeño implica un radio grande y una relación  $L/R$  grande implica un radio pequeño; por lo que respecta al presente trabajo el radio de menor tamaño empleado en la simulación propició un comportamiento unidireccional, sin embargo dicho comportamiento no se puede extrapolar para valores menores o mayores a los mostrados en la tabla 4.2.

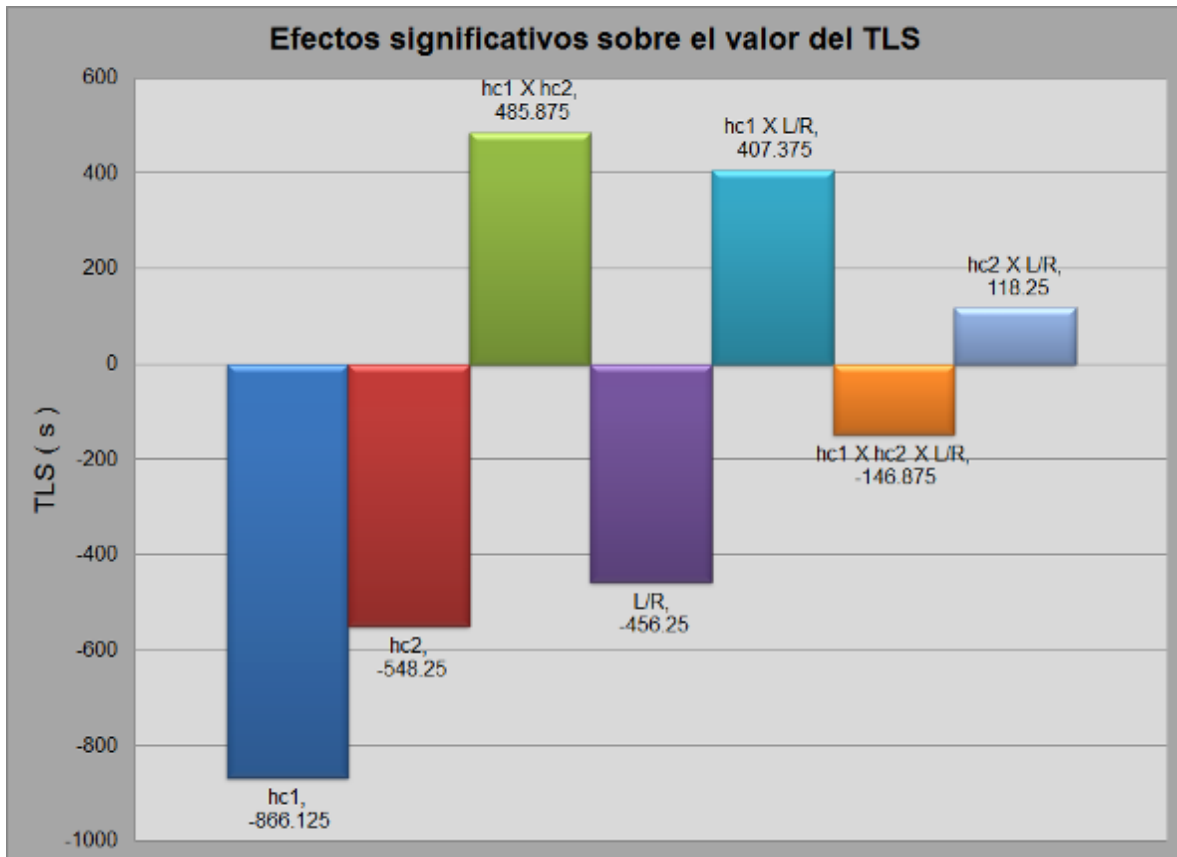
De acuerdo a los efectos principales se puede decir que para obtener tiempos locales de solidificación bajos se requieren valores altos de  $hc_1$ ,  $hc_2$ , relaciones  $L/R$  altas, sobrecalentamientos y temperaturas del fluido de enfriamiento bajas. Por su parte para favorecer la unidireccionalidad se necesitan valores altos de  $hc_1$ , valores bajos de  $hc_2$ , relaciones  $L/R$  altas, sobrecalentamiento y temperaturas del fluido de enfriamiento bajas.

Los efectos principales ya se describieron, pero en la simulación se observó que el factor más importante, en lo que concierne a la unidireccionalidad, es la relación de  $hc_1/hc_2$ . Mientras esta relación se mantenga igual o mayor a 10, el sistema se comporta unidireccionalmente.

Otro hecho que saltó a la vista desde la simulación fue la obtención de un comportamiento unidireccional con el valor calculado de  $hc_2$  ( $36 \text{ W/m}^2\text{K}$ ). Como se recordará este valor es el máximo valor teórico. Representa a la aleación enfriándose al aire libre, sin nada que la contenga. El hecho de obtener unidireccionalidad con este valor garantiza que el sistema se comportará de la misma forma sin importar el material que se utilice para contenerlo o aislarlo. Y todo es debido a las propiedades termofísicas de la aleación.

Los demás efectos que se muestran en la tabla 5.2 corresponden al efecto de interacción de las variables. Los efectos del 7 al 16 toman en consideración la

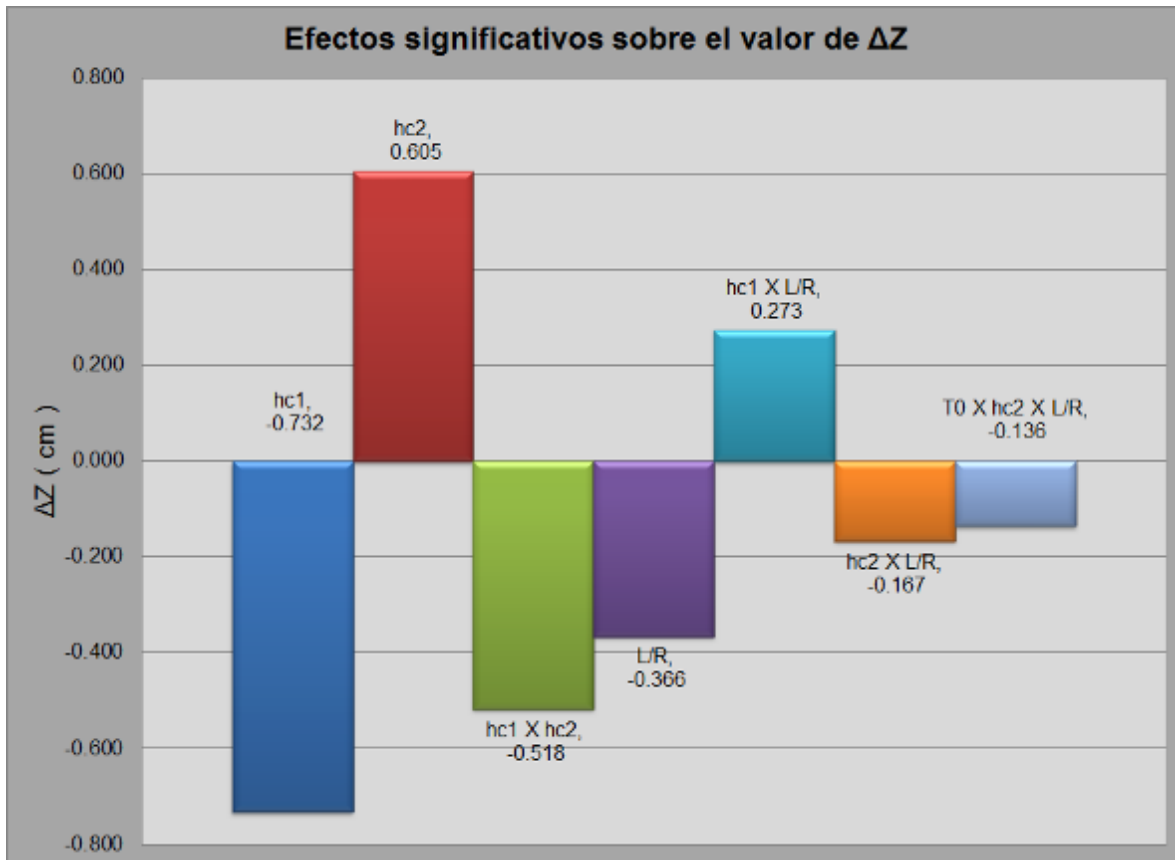
interacción de dos variables. Del efecto 17 al 26 se evalúa la interacción de tres variables y así sucesivamente hasta considerar la interacción de las 5 variables involucradas, cuyo efecto es el número 32. Todos estos efectos miden la influencia que tiene las posibles combinaciones de los factores en la respuesta.



**Fig. 5.5. Efectos significativos sobre la respuesta del TLS.**

Es muy común que estos efectos de interacción disminuyan su valor, cuantos más factores se consideren al evaluarlos. Como ejemplo se puede observar el efecto 32.

Se dice que existe interacción cuando el efecto de un factor depende de qué valor tome otro factor o combinación de factores. Entre más cercano a 0 se encuentre el valor de estos, se dice que no hay interacción y que los factores son independientes.



**Fig. 5.6. Efectos significativos sobre la respuesta de  $\Delta Z$**

En las figuras 5.5 y 5.6 se muestran en forma descendiente los efectos más importantes para cada una de las respuestas evaluadas. Sobresalen los factores de enfriamiento, de geometría y sus interacciones. El efecto de la  $T_{\infty}$  y del sobrecalentamiento no se compara en magnitud con respecto a los otros factores y por eso no aparecen en las figuras.

El valor numérico de los efectos de interacción al igual que con los efectos principales, es resultado de un promedio de las respuestas positivas y negativas de todos los experimentos. Solo que en los casos de los efectos principales el valor numérico corresponde directamente a un aumento o disminución de la respuesta y se puede interpretar de tal manera. Para el caso de los efectos de interacción no se debe tener la misma lectura.



Por ejemplo, el valor del efecto 14 ( $b_{hc_1 \times hc_2}$ ) en la respuesta de tiempo local de solidificación en  $Z=17.5$  es de 485.875. Si se interpreta este valor de la misma forma que los efectos principales, se podría decir que el efecto combinado promedio de estas dos variables es aumentar el tiempo local de solidificación en poco menos de 486 segundos; pero lo anterior se contradice con el efecto principal de  $hc_1$ , y  $hc_2$  el cual indica que ambas disminuyen dicha respuesta.

Por tal motivo los efectos de interacción solo se deben considerar como el promedio de las respuestas positivas y negativas. Las respuestas serán positivas o negativas de acuerdo a la combinación de los factores en la matriz de experimentos.

## CAPÍTULO 6 CONCLUSIONES

- De las cinco variables analizadas, la que tiene un mayor efecto en la disminución del tiempo local de solidificación y en favorecer una conducta unidireccional es  $hc_1$ .
- La relación  $hc_1/hc_2$  igual o mayor a 10, es capaz de producir un comportamiento unidireccional por si sola en la aleación Al-Cu4.5%.
- El tercer factor en importancia para la unidireccionalidad y la disminución del tiempo local de solidificación es la relación L/R, la cual guarda una estrecha interacción con  $hc_1$  y  $hc_2$ .
- El efecto del sobrecalentamiento ocupa un cuarto lugar en importancia. Su efecto no es despreciable, aunque si es mucho menor que el efecto de  $hc_1$ ,  $hc_2$  o la relación L/R.
- Una relación de  $Bi_Z/Bi_R \geq 111.5$  favorece un comportamiento unidireccional.
- Para disminuir el tiempo local de solidificación se necesitan valores de  $hc_1$  elevados, valores de  $hc_2$  elevados, radios pequeños o relaciones de L/R grandes, sobrecalentamiento y valores de  $T_\infty$  bajos.
- Para favorecer la unidireccionalidad se requieren valores de  $hc_1$  elevados, valores de  $hc_2$  bajos, radios pequeños o relaciones L/R altos, sobrecalentamiento y valores de  $T_\infty$  bajos.
- Debido a sus propiedades termofísicas, la aleación Al-Cu4.5%, es un material que facilita un buen control para obtener un comportamiento de unidireccionalidad en cuanto a su solidificación se refiere.

## BIBLIOGRAFÍA

1. Kurtz W., Fisher D.J., ***Fundamentals of Solidification***, 3<sup>rd</sup> ed., Trans Tech Publications, Switzerland, 1989.
2. Glicksman Martin E., ***Principles of Solidification***, 1<sup>st</sup> ed. Springer, New York, 2011.
3. Verhoeven John D., ***Fundamentals of Physical Metallurgy***, 1<sup>st</sup> ed., John Wiley & Sons, 1975.
4. ASM Handbook Vol. 15 ***Casting***, 2004.
5. Flemmings M.C., ***Solidification Processing***, McGraw Hill, New York, 1974.
6. Smallman R. E., Ngan A.H.W., ***Physical Metallurgy and Advanced Materials***, 7<sup>th</sup> ed., Butterworth-Heinemann, 2007.
7. McLean M., ***Directionally Solidified Materials for High Temperature Service***, 1<sup>st</sup> ed. The Metals Society, 1983.
8. ASM Handbook Vol. 9 ***Metallography and Microstructures***, 2004.
9. Szekely J., ***The Mathematical Modelling Revolution in Extractive Metallurgy***, Metallurgical Transactions B, Agosto 1988. Vol. 19B, p. 525-540.
10. Szekely J., ***The Mathematical and Physical Modelling of Metals Processing***, Operations Metallurgical Treatises, T.M.S., p. 277-289.
11. Stefanescu D.M., ***Science and Engineering of Casting Solidification***, 2<sup>nd</sup> ed., Springer, 2011.
12. Koler A.I., ***Computations of Heat of Fusion in a Mathematical Model for Large Steel Cast Shapes***.
13. Clyne T.W., ***Numerical Modelling of Directional Solidification of Metallic Alloys***, Metal Science, Septiembre 1982, Vol 16, p. 441-450.
14. Thomas D. Murphy, ***Design and analysis of industrial experiments***, Chemical Engineering, June 1977, p. 168-182.
15. <http://www.quimica.urv.es/quimio/general/disfact.pdf>
16. <http://argo.urv.es/quimio/general/doecast.pdf>

17. Kreith Frank, Black William Z., **Basic Heat Transfer**, 1<sup>st</sup> ed., Harper & Row Publishers, New York, 1980.
18. Holman J.P., **Transferencia de Calor**, 8<sup>a</sup> edición, McGraw-Hill, España, 1998.
19. Incropera Frank P., De Witt David P., **Fundamentos de Transferencia de Calor**, 4<sup>a</sup> edición, Prentice Hall, México, 1999.
20. Suri V.K, El-Kaddah N, Berry J.T., **Control of Macrostructure in Aluminium Castings, Part 1: Determination of Columnar/Equiaxed Transition for Al-4.5%Cu Alloy**, AFS Transactions, p. 187-191.
21. Caldwell T.W., Campagna A.J, Flemings M.C., Mehrabian R. **Refinement of Dendrite Arm Spacings in Aluminum Ingots Through Heat Flow Control**. Metallurgical Transactions B. Vol. 8B, Junio 1977, pag. 261-270.

## APENDICES

### A.1 Calculo del $h_{c2}$ . [17, 18, 19]

El coeficiente de transferencia de calor por convección en la parte lateral del sistema, reemplaza al material aislante que contiene al metal fundido. Este valor, en realidad, toma en consideración el efecto de la pérdida de calor por radiación y por convección natural. Es decir

$$h_{c2} = h_{\infty} + h_r \quad \text{A.1.1}$$

La transferencia de calor debida a la radiación se puede representar:

$$q_r = A\varepsilon\sigma(T_S^4 - T_{\infty}^4) \quad \text{A.1.2}$$

en donde A es el área de transferencia de calor en  $m^2$ ,

$\varepsilon$  es la emisividad, con valores de  $0 \leq \varepsilon \leq 1$ ,

$\sigma$  es la constante de Stefan-Boltzmann,  $5.67 \times 10^{-8} \text{ W/m}^2\text{K}^4$ ,

$T_S$  es la temperatura de la superficie y

$T_{\infty}$  es la temperatura del medio.

En el presente trabajo es más conveniente expresar el intercambio de calor debido a la radiación, de la siguiente manera:

$$q_r = Ah_r(T_S - T_{\infty}) \quad \text{A.1.3}$$

de la ecuación A.1.2, el coeficiente de transferencia de calor por radiación se define como:

$$h_r = \varepsilon\sigma(T_S + T_{\infty})(T_S^2 + T_{\infty}^2) \quad \text{A.1.4}$$

El valor de  $h_{\infty}$  se calcula con ayuda de correlaciones empíricas para flujos externos de convección libre. El primer valor necesario es el número adimensional de Rayleigh.

$$Ra = \frac{g\beta(T_S - T_{\infty})L^3}{\nu\alpha} \quad \text{A.1.5}$$

en donde  $g$  es la aceleración de la gravedad ( $m/s^2$ ),  
 $\beta$  es el coeficiente de expansión para el aire ( $1/K$ ),  
 $T_S$  es la temperatura de la superficie (K),  
 $T_{\infty}$  es la temperatura del fluido (K),  
 $L$  es la longitud característica del sistema (m)  
 $\nu$  es la viscosidad cinemática del aire ( $m^2/s$ )  
 $\alpha$  es la difusividad térmica del aire ( $m^2/s$ ).

La viscosidad cinemática, la difusividad térmica y el coeficiente de expansión se evalúan a la temperatura de película.

$$T_f \equiv \frac{(T_S + T_{\infty})}{2} \quad \text{A.1.6}$$

El segundo valor adimensional es el número de Nussel

$$Nu = 0.68 + \frac{0.670Ra^{1/4}}{\left[1 + \left(\frac{0.492}{Pr}\right)^{9/16}\right]^{4/9}} \quad Ra \leq 10^9 \quad \text{A.1.7}$$

$Pr$  es el número adimensional de Prandalt evaluado a la temperatura de película.

Una vez que se conoce el Nussel se emplea la siguiente ecuación para conocer el valor del coeficiente promedio convectivo:

$$h_{\infty} = \frac{Nuk}{L} \quad \mathbf{A.1.8}$$

En donde k es la conductividad térmica del aire, evaluado a la temperatura de película. (W/mK) y

L es la longitud del sistema (m)

Se evalúa A.1.4 y A.1.8 a la temperatura propuesta (933 K) y finalmente se suman sus valores, para obtener el valor de  $h_{c2}$ .

## **A.2 Propiedades de la Aleación Al-4.5%Cu. [20,21]**

<b>Conductividad térmica (W/mK)</b>	92 (líquido) 112 (mushy) 132(sólido)
<b>Calor específico (J/KgK)</b>	921 (líquido) 6245.3 (mushy) 900 (sólido)
<b>Densidad (Kg/m<sup>3</sup>)</b>	2450 (líquido) 2530 (mushy) 2610 (sólido)
<b>Calor latente de fusión (KJ/Kg)</b>	394
<b>Coeficiente de partición</b>	0.173
<b>Pendiente liquidus</b>	-3.39
<b>Pendiente solidus</b>	-19.54
<b>Temperatura liquidus (K)</b>	919
<b>Temperatura solidus (K)</b>	845



### A.3 Desarrollo del Balance de Energía Nodal. [17]

Una vez que el sistema ha sido discretizado, el siguiente paso es realizar un balance de energía en cada nodo. El balance de energía que se presenta a continuación es el correspondiente al nodo (1,1). Dicho nodo es el que se encuentra ubicado en el centro de la parte inferior del sistema. Fig A.3.1.

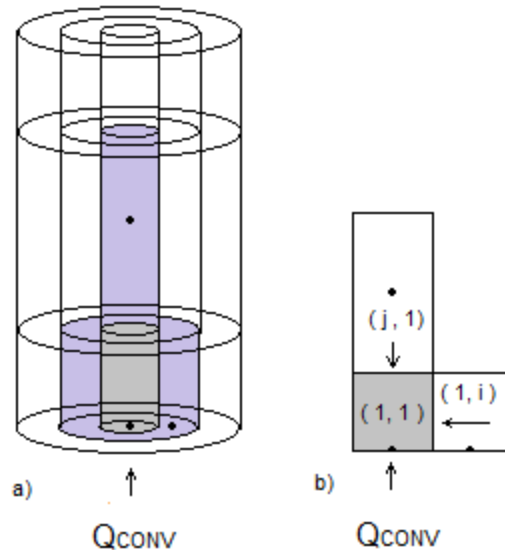


Figura A.3.1. a) Esquema de ubicación del nodo (1,1), b) esquema de las aportaciones calóricas hacia el nodo (1,1)

El nodo (1,1) tiene 3 contribuciones energéticas: la primera se encuentra en la parte inferior, la cual es representada por la condición de frontera convectiva; la segunda es el aporte calórico del nodo que se encuentra en la parte superior, el nodo (j,1); la tercera y última aportación es debida al nodo (1, i).

La suma de energía de los dos nodos y de la frontera convectiva debe ser igual a la razón de cambio de la energía interna del nodo (1,1). Es decir

$$Q_{(j,1) \rightarrow (1,1)} + Q_{(1,i) \rightarrow (1,1)} + Q_{conv} = \frac{\partial U_{(1,1)}}{\partial t} \quad \mathbf{A.3.1}$$

Al expresar la ley de Fourier en diferencias finitas se tiene

$$Q_{(j,1) \rightarrow (1,1)} = -kAu_{(1,1)} \left[ \frac{T_{(1,1)}^t - T_{(j,1)}^t}{\Delta z} \right] \quad \text{A.3.2}$$

$$Q_{(1,i) \rightarrow (1,1)} = -kAr_{(1,1)} \left[ \frac{T_{(1,1)}^t - T_{(1,i)}^t}{\Delta r} \right] \quad \text{A.3.3}$$

$$Q_{conv} = -h_{c1}Ad_{(1,1)}(T_{(1,1)}^t - T_{\infty}^t) \quad \text{A.3.4}$$

El superíndice t en las expresiones anteriores hace referencia al hecho de que las temperaturas están evaluadas al tiempo presente. El subíndice indica la localización del nodo. De esta manera las temperaturas quedan bien identificadas en el tiempo y el espacio.

El incremento de la energía interna del nodo (1,1), al asumir densidad y capacidad calorífica constante, se representa de la siguiente manera

$$\frac{\partial U}{\partial t} = mCp \frac{\Delta T_{(1,1)}}{\Delta t} = \rho CpV_{(1,1)} \left[ \frac{T_{(1,1)}^{t+\Delta t} - T_{(1,1)}^t}{\Delta t} \right] \quad \text{A.3.5}$$

Al sustituir las expresiones A.3.2 – A.3.4 en la ecuación A.3.1 se obtiene el balance de energía para el nodo (1,1).

$$-kAu_{(1,1)} \left[ \frac{T_{(1,1)}^t - T_{(j,1)}^t}{\Delta z} \right] - kAr_{(1,1)} \left[ \frac{T_{(1,1)}^t - T_{(1,i)}^t}{\Delta r} \right] - h_{c1}Ad_{(1,1)}(T_{(1,1)}^t - T_{\infty}^t) = \rho CpV_{(1,1)} \left[ \frac{T_{(1,1)}^{t+\Delta t} - T_{(1,1)}^t}{\Delta t} \right] \quad \text{A.3.6}$$

Una vez que se obtiene el balance general, se procede por despejar el término  $T_{(1,1)}^{t+\Delta t}$ .

$$-\frac{kAu_{(1,1)}}{\rho CpV_{(1,1)}} \left[ \frac{T_{(1,1)}^t - T_{(j,1)}^t}{\Delta z} \right] - \frac{kAr_{(1,1)}}{\rho CpV_{(1,1)}} \left[ \frac{T_{(1,1)}^t - T_{(1,i)}^t}{\Delta r} \right] - \frac{h_{c1}Ad_{(1,1)}}{\rho CpV_{(1,1)}} [T_{(1,1)}^t - T_{\infty}^t] = \left[ \frac{T_{(1,1)}^{t+\Delta t} - T_{(1,1)}^t}{\Delta t} \right]$$

Recordando que  $\alpha = k/\rho Cp$  se tiene

$$-\frac{\alpha\Delta t Au_{(1,1)}}{\Delta z V_{(1,1)}} [T_{(1,1)}^t - T_{(j,1)}^t] - \frac{\alpha\Delta t Ar_{(1,1)}}{\Delta r V_{(1,1)}} [T_{(1,1)}^t - T_{(1,i)}^t] - \frac{h_{c1}\Delta t Ad_{(1,1)}}{\rho C p V_{(1,1)}} [T_{(1,1)}^t - T_{\infty}^t] = [T_{(1,1)}^{t+\Delta t} - T_{(1,1)}^t]$$

Es muy común el uso de números adimensionales como el Fourier y el Biot para reagrupar términos, sin embargo estos números requieren que las distancias nodales sean iguales ( $\Delta z = \Delta r$ ) y en este sistema no lo son, por lo tanto el uso de estos números ha sido remplazado por una designación arbitraria de literales.

$$A = \frac{\alpha\Delta t}{\Delta z} B = \frac{\alpha\Delta t}{\Delta r} C = \frac{h_{c1}\Delta t}{\rho C p} D = \frac{h_{c2}\Delta t}{\rho C p} E = \frac{h_{c3}\Delta t}{\rho C p}$$

Es importante recordar que el Biot y el Fourier no solo se emplean para reagrupar términos, cada uno proporciona información relevante del sistema, ver apéndice A.4. Por otra parte el uso de las literales propuesto en el presente trabajo, solo tiene como fin la reagrupación de términos.

$$-A \frac{Au_{(1,1)}}{V_{(1,1)}} [T_{(1,1)}^t] + A \frac{Au_{(1,1)}}{V_{(1,1)}} [T_{(j,1)}^t] - B \frac{Ar_{(1,1)}}{V_{(1,1)}} [T_{(1,1)}^t] + B \frac{Ar_{(1,1)}}{V_{(1,1)}} [T_{(1,i)}^t] - C \frac{Ad_{(1,1)}}{V_{(1,1)}} [T_{(1,1)}^t] + C \frac{Ad_{(1,1)}}{V_{(1,1)}} [T_{\infty}^t] + [T_{(1,1)}^t] = [T_{(1,1)}^{t+\Delta t}]$$

Reagrupando, finalmente se obtiene

### A.3.7

$$A \frac{Au_{(1,1)}}{V_{(1,1)}} [T_{(j,1)}^t] + B \frac{Ar_{(1,1)}}{V_{(1,1)}} [T_{(1,i)}^t] + C \frac{Ad_{(1,1)}}{V_{(1,1)}} [T_{\infty}^t] + \left[ 1 - A \frac{Au_{(1,1)}}{V_{(1,1)}} - B \frac{Ar_{(1,1)}}{V_{(1,1)}} - C \frac{Ad_{(1,1)}}{V_{(1,1)}} \right] [T_{(1,1)}^t] = [T_{(1,1)}^{t+\Delta t}]$$

La ecuación A.3.7 indica que la temperatura futura,  $t+\Delta t$ , puede ser evaluada conociendo el valor de las temperaturas al tiempo presente.

#### **A.4 Número de Biot. [17]**

El número de Biot es un número adimensional que se define como la relación de la resistencia térmica interna de un sólido a la resistencia térmica de la capa límite.

$$\frac{R_{Cond}}{R_{Conv}} = \frac{\left(\frac{L}{kA}\right)}{\left(\frac{1}{hA}\right)} = \frac{hL}{k} = Bi \quad \text{A.4.1}$$

En donde h es el coeficiente de transferencia de calor convectivo (W/m<sup>2</sup>K),

L es la longitud característica del sistema (m) y

k es la conductividad térmica del sistema (W/mK).

El valor del Biot indica donde ocurre la mayor resistencia a la transferencia de calor. Un valor grande indica que la resistencia a la conducción es la que controla el proceso, esto es, que existe una mayor capacidad para que el calor abandone la superficie por convección que para que llegue a ella por conducción. Un valor pequeño representa el caso en el que la resistencia interna es despreciable y existe una mayor capacidad para transferir calor por conducción que por convección. En este último caso, el fenómeno que rige la transferencia es la convección y los gradientes de temperatura del sistema son muy pequeños.

En otras palabras, se entiende que entre mayor sea el Biot en una dirección, mayor será el flujo de calor transferido por conducción en esa dirección.

Se ha establecido el siguiente criterio para determinar si un sistema no presenta gradientes significativos.

$$Bi = \frac{hL}{k} \leq 0.1 \quad \text{A.4.2}$$

La longitud característica se acostumbra definir como la relación entre el volumen del sólido y el área de la superficie. Para un cilindro la longitud característica en dirección z corresponde a L y en dirección radial se acostumbra usar  $r/2$ .

Al calcular los números de Biot, con las condiciones de simulación empleadas en el presente trabajo, se observa que solamente en la dirección axial se presentan gradientes térmicos significativos. Sin embargo, en los resultados se presentaron 8 corridas con un comportamiento bidireccional, los números de Biot correspondientes a dichas corridas se encuentran resaltados en las tablas A.4.1 y A.4.2.

Al calcular la relación de  $Bi_z/Bi_R$ , se concluyó que para valores mayores o igual a 111.5, el sistema se comporta unidireccionalmente, ver tabla A.4.2.

**Tabla A.4.1 Valores de Biot en Z con  $k=132$  W/mK. El valor remarcado representa el valor de Biot con el que se obtuvieron corridas bidireccionales.**

$h_1$	Biot
100	0.1516
10000	15.16

**Tabla A.4.2 Valores de Biot en R con  $k=132$  W/mK y valores de la relación  $Bi_z/Bi_R$ . Los valores remarcados representan los valores de Biot con los que se obtuvieron corridas bidireccionales.**

Propiedades		Biot Radial	Relación de $Bi_z/Bi_R$	
			$Bi_z=0.1516$	$Bi_z=15.16$
$h_2$	9	$4.26 \times 10^{-4}$	355.9	35586.9
R	0.0125			
$h_2$	9	$1.36 \times 10^{-3}$	111.5	11147.1
R	0.04			
$h_2$	36	$1.70 \times 10^{-3}$	89.2	8917.6
R	0.0125			
$h_2$	36	$5.45 \times 10^{-3}$	27.8	2781.7
R	0.04			