



UNIVERSIDAD NACIONAL AUTÓNOMA DE MÉXICO
PROGRAMA DE MAESTRÍA Y DOCTORADO EN INGENIERÍA
(QUÍMICA) – (MATERIALES)

“Estudio de la cinética de crecimiento de grano durante la solidificación”

TESIS
QUE PARA OPTAR POR EL GRADO DE:
DOCTOR EN INGENIERÍA

PRESENTA:
MIGUEL ANGEL MORUA RAMÍREZ

TUTOR PRINCIPAL
DR. CARLOS GONZÁLEZ RIVERA, FACULTAD DE QUÍMICA

MÉXICO, C.D.M.X. AGOSTO 2022



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: DR. MARCO AURELIO RAMÍREZ ARGAEZ

SECRETARIO: DR. OSVALDO FLORES CEDILLO.

1^{ER} VOCAL: DR. IGNACIO ALEJANDRO FIGUEROA VARGAS

2^{DO} VOCAL: DR. ARTURO JUÁREZ HERNÁNDEZ

3^{ER} VOCAL: DR. MARTIN HERRERA TREJO

**Lugar o lugares donde se realizó la tesis: FACULTAD DE QUÍMICA UNAM,
DEPARTAMENTO DE INGENIERÍA METALÚRGICA**

TUTOR DE TESIS:

DR. CARLOS GONZÁLEZ RIVERA

FIRMA

“Solo puede ser intrépido quien conoce el miedo, pero lo supero; quien ve el abismo con orgullo. Quien ve el abismo con ojos de águila; quien con garra de águila se aferra al abismo; ese tiene valor.”

Friedrich Wilhelm Nietzsche

“Nadie puede construir un mundo mejor sin mejorar a las personas. Cada uno debe trabajar para su propia mejora.”

María Salomea Skłodowska

Agradecimientos

Al programa de apoyo a estudiantes de posgrado otorgado por CONACYT, por el apoyo para la realización de este estudio doctoral.

A la Universidad Nacional Autónoma de México, como institución formadora tiene una base sustentada en la ciencia.

Al programa de posgrado de ingeniería de la UNAM, por su enorme apoyo.

Al Dr. Carlos González Rivera, por su paciencia, inspiración y motivación de seguir adelante.

Dedicada a Étienne Morua Campos, motor de mi corazón y apasionado de la ciencia.

ÍNDICE

RESUMEN	- 1 -
ABSTRACT	- 2 -
CAPÍTULO 1 ANTECEDENTES	- 4 -
1.1 MODELADO DE LA FORMACIÓN DE MICROESTRUCTURA DE SOLIDIFICACIÓN	- 4 -
1.2 MODELOS DE CRECIMIENTO DENDRÍTICO EMPLEADOS POR MODELOS AUTÓMATA CELULAR- ELEMENTO FINITO (CAFE). ..	- 9 -
1.3 NUCLEACIÓN Y CRECIMIENTO DE GRANO DURANTE LA SOLIDIFICACIÓN	- 13 -
1.4 CRECIMIENTO EUTÉCTICO	- 17 -
1.5 METODOLOGÍAS PROPUESTAS PARA DETERMINAR EXPERIMENTALMENTE LOS PARÁMETROS DE CRECIMIENTO DE GRANO EUTÉCTICO	- 20 -
1.6 CRECIMIENTO DENDRÍTICO	- 22 -
1.7 MODELO LGK MULTICOMPONENTE	- 28 -
HIPÓTESIS	- 30 -
OBJETIVOS	- 30 -
CAPÍTULO 2 PROPUESTA DE MÉTODOS PARA DETERMINAR LA CINÉTICA DE CRECIMIENTO DE GRANO DURANTE LA SOLIDIFICACIÓN Y SU VALIDACIÓN.	- 31 -
2.1 PROPUESTA DEL MÉTODO DE CRECIMIENTO LIBRE PARA DETERMINAR LA CINÉTICA DE CRECIMIENTO DE GRANOS EUTÉCTICOS DURANTE LA SOLIDIFICACIÓN.	- 31 -
2.2 AMPLIACIÓN DE LA APLICACIÓN DEL MÉTODO DE CRECIMIENTO LIBRE A LA OBTENCIÓN DE PARÁMETROS DE CRECIMIENTO DE GRANOS EQUIAXIALES DENDRÍTICOS.	- 34 -
2.3 IMPLEMENTACIÓN DEL ANÁLISIS TÉRMICO DE FOURIER Y NEWTON	- 39 -
2.4 DESARROLLO DE UNA HERRAMIENTA DE VALIDACIÓN: MICRO MACRO MODELO DE SOLIDIFICACIÓN DE ALEACIONES EUTÉCTICAS E HIPOEUTÉCTICAS.	- 42 -
2.4.1 <i>Modelo microscópico de cinética de solidificación de una aleación eutéctica.</i>	- 49 -
2.4.2 <i>Modelo microscópico de cinética de solidificación de una aleación hipoeutéctica.</i>	- 52 -
2.4.3 <i>Aplicación del modelo LGK multicomponente.</i>	- 61 -
2.5 DESARROLLO DE MÉTODO INVERSO PARA OBTENER DATOS DE COEFICIENTE COMBINADO DE TRANSPORTE DE CALOR.	- 63 -
CAPÍTULO 3 DESARROLLO EXPERIMENTAL	- 67 -
3.1 DISEÑO Y CONSTRUCCIÓN DEL ARREGLO EXPERIMENTAL	- 67 -
3.2 PROCEDIMIENTO EXPERIMENTAL.	- 70 -
3.3 DETERMINACIÓN DE LA DENSIDAD DE GRANOS.	- 71 -
3.4 DETERMINACIÓN DE LA FRACCIÓN SÓLIDA MEDIANTE LA APLICACIÓN DE LOS MÉTODOS DE NEWTON Y DE FOURIER.	- 74 -
3.5 DETERMINACIÓN DE LOS PARÁMETROS DE CRECIMIENTO DE GRANO.	- 77 -
CAPÍTULO 4 RESULTADOS Y ANÁLISIS	- 80 -
4.1 ALEACIONES EUTÉCTICAS.....	- 80 -
4.1.1 <i>Curvas de enfriamiento de aleaciones eutécticas.</i>	- 81 -
4.1.2 <i>Evolución de la fracción sólida de aleaciones eutécticas</i>	- 83 -
4.1.3 <i>Macroestructuras y densidad de grano de aleaciones eutécticas</i>	- 84 -
4.1.4 <i>Modificación propuesta del método de Dioszegi.</i>	- 85 -
4.1.5 <i>Determinación de parámetros cinéticos de crecimiento de grano en aleaciones eutécticas</i>	- 87 -
4.1.6 <i>Efectos de la velocidad de enfriamiento en los parámetros cinéticos de aleaciones eutécticas y validación inicial de los valores obtenidos.</i>	- 90 -

4.1.7 Aplicación del método inverso para obtener el coeficiente global de transporte de aleaciones eutécticas.....	- 95 -
4.1.8 Validación y comparación de los parámetros obtenidos mediante su aplicación en el micromacro modelo de aleaciones eutécticas.	- 97 -
4.2 ALEACIONES HIPOEUTÉCTICAS CON MORFOLOGÍA EQUIAXIAL DENDRÍTICA.	- 100 -
4.2.1 Curvas de enfriamiento de aleaciones hipoeutécticas.....	- 101 -
4.2.2 Evolución de la fracción sólida en aleaciones hipoeutécticas.	- 103 -
4.2.3 Determinación del punto de coherencia dendrítico.	- 103 -
4.2.4 Macroestructuras y densidad de grano en aleaciones hipoeutécticas.	- 106 -
4.2.5 Aplicación de los métodos cinéticos de caracterización de crecimiento de grano en aleaciones hipoeutécticas.....	- 107 -
4.2.6 Comparación de los parámetros de crecimiento de grano obtenidos por el método FG y los generados por el modelo LGK en aleaciones hipoeutécticas Al-Cu.....	- 108 -
4.2.7 Aplicación del método inverso para obtener el coeficiente global de transporte en aleaciones hipoeutécticas.....	- 112 -
4.2.8. Validación y comparación de los parámetros obtenidos mediante su aplicación en el micromacro modelo en aleaciones hipoeutécticas.	- 113 -
CONCLUSIONES.....	- 117 -
ABREVIATURAS, SUBÍNDICES, SUPERÍNDICES Y SIMBOLOS	- 119 -
ÍNDICE DE FIGURAS.....	- 122 -
ÍNDICE DE TABLAS.....	- 129 -
ANEXO I. FUNDAMENTOS TERMODINÁMICOS DE LA SOLIDIFICACIÓN.	- 140 -
ANEXO II. DEDUCCIÓN DETALLADA DE ECUACIONES DEL MICROMACROMODELO.	- 145 -
ANEXO III. RESULTADOS DE COMPOSICIÓN DE CADA EXPERIMENTO.	- 152 -
ANEXO IV. DATOS DE DENSIDAD DE GRANO DE CADA EXPERIMENTO.	- 155 -
ANEXO V. MACROESTRUCTURAS OBTENIDAS EXPERIMENTALMENTE	- 157 -
ANEXO VI. EVOLUCIÓN DE LA FRACCIÓN SÓLIDA.....	- 161 -
ANEXO VII. EVOLUCIÓN DEL PUNTO DE COHERENCIA.....	- 163 -
ANEXO VIII. CURVAS CINÉTICAS.	- 165 -
ANEXO IX. CÓDIGO DEL PROGRAMA MICRO-MACROSCÓPICO USADO PARA LA SIMULACIÓN DE ALEACIONES EUTÉCTICA E HIPOEUTÉCTICAS.	- 170 -
ANEXO X. CÓDIGO DEL PROGRAMA DE MÉTODO INVERSO PARA LA OBTENCIÓN DE COEFICIENTE COMBINADO DE TRANSPORTE.....	- 173 -
ANEXO XI. CÓDIGO DE PROGRAMA DE ANÁLISIS TÉRMICO DE NEWTON Y FOURIER.	- 176 -
ANEXO XII. CÓDIGO DEL PROGRAMA QUE APLICA EL METODO LGK.	- 179 -
ANEXO XIII. PORTADA DE ARTICULO Y DOCUMENTO DE APROVACIÓN.	- 183 -

RESUMEN

En este trabajo se propone y se valida un nuevo método para procesar la información térmica y microestructural obtenida durante el enfriamiento y solidificación de aleaciones eutécticas e hipoeutécticas, con el fin de generar modelos cinéticos de crecimiento de grano durante su solidificación.

Para tal efecto se elaboró un dispositivo experimental que permite obtener información térmica y microestructural mediante el enfriamiento unidireccional en la dirección radial de muestras inicialmente líquidas de aleaciones selectas durante su enfriamiento y solidificación.

Se aplicó la metodología propuesta y el dispositivo elaborado, para obtener, a partir del procesamiento numérico de las curvas de enfriamiento, así como de la densidad de granos presente en las probetas experimentales, los valores de los parámetros pre exponencial y exponencial de crecimiento de grano de aleaciones eutécticas Al-Cu, Al-Si y Al-Ni e hipoeutécticas Al-Cu.

Se implementó en un programa de cómputo, un modelo mecanístico y una metodología para comparar el desempeño de los parámetros de crecimiento de grano obtenidos con el método propuesto, con los obtenidos por otros métodos y modelos reportados en la literatura, en cuanto a su capacidad de simular las curvas de enfriamiento experimental, durante la nucleación y el crecimiento de los granos.

Se validó la pertinencia de los parámetros de crecimiento de grano obtenidos por el método propuesto, comparando estos valores con los predichos por otros métodos y modelos reportados en la literatura, así como comparando su capacidad para simular las curvas de enfriamiento experimental, en los momentos iniciales de la solidificación.

Se estudió experimentalmente el efecto de la velocidad de enfriamiento sobre los parámetros cinéticos de crecimiento equiaxial eutéctico para el caso de los eutécticos Al-Cu, Al-Si y Al-Ni enfriados y solidificados a tres diferentes velocidades de enfriamiento.

Los resultados obtenidos muestran que el aumento en la velocidad de enfriamiento incrementa la densidad de granos y la velocidad de crecimiento de estos, lo cual se refleja en la curva de enfriamiento con una disminución del subenfriamiento máximo y en un aumento de la temperatura promedio presente en la meseta eutéctica.

Se estudió experimentalmente el efecto del cambio del contenido de soluto sobre los parámetros cinéticos de crecimiento de grano durante la solidificación de las aleaciones hipoeutécticas Al-3%Cu, Al-4%Cu y Al-5%Cu.

Los resultados obtenidos de la aplicación del método propuesto a aleaciones hipoeutécticas Al-Cu con tres diferentes contenidos de Cu muestran que el incremento en el contenido de soluto provoca un incremento en la densidad de granos y en la fracción sólida en el punto de coherencia dendrítica, así como una disminución en los valores de los parámetros de crecimiento de grano y en

consecuencia una disminución en la velocidad de crecimiento de grano, lo cual junto con el resto de los resultados sugiere un cambio relevante en el número, morfología y velocidad de crecimiento de los granos, asociados al incremento y posible segregación del soluto hacia el líquido remanente.

Los resultados obtenidos sugieren que el método propuesto es capaz de determinar parámetros de crecimiento de grano que permiten modelar aceptablemente curvas de enfriamiento experimental y con esto la cinética de crecimiento de grano de aleaciones eutécticas e hipoeutécticas.

ABSTRACT

In this work, a new method is proposed and validated to process the thermal and microstructural information obtained during the cooling and solidification of eutectic and hypoeutectic alloys to generate kinetic models of grain growth during solidification.

For this purpose, an experimental device was developed that allows thermal and microstructural information to be obtained through unidirectional cooling in the radial direction of initially liquid samples of selected alloys during their cooling and solidification.

The methodology and the device were applied to obtain from the numerical processing of the cooling curves as well as the density of grains present in the experimental specimens, the values of the pre-exponential and exponential parameters of grain growth of eutectic Al-Cu, Al-Si, and Al-Ni, and hypoeutectic Al-Cu alloys.

It was implemented in a computer program, a mechanistic model, and a methodology to compare the performance of the grain growth parameters obtained with the proposed method, with those obtained by other methods and models reported in the literature, in terms of their ability to simulate experimental cooling curves during nucleation and grain growth.

The relevance of the grain growth parameters obtained by the proposed method was validated, comparing these values with those predicted by other methods and models reported in the literature and comparing their ability to simulate the experimental cooling curves at the initial moments of solidification.

The effect of cooling rate on the eutectic equiaxed growth kinetic parameters was experimentally studied for the case of Al-Cu, Al-Si and, Al-Ni eutectic alloys cooled and solidified at three different cooling rates.

The results obtained show that the increase in the cooling rate increases the density of grains and their growth rate, which is reflected in the cooling curve with a decrease in maximum undercooling and an increase in the average temperature of the eutectic plateau.

Changing solute content on grain growth kinetic parameters during solidification of hypoeutectic Al-3%Cu, Al-4%Cu, and Al-5%Cu alloys was studied experimentally.

The results obtained by applying the proposed method to hypoeutectic Al-Cu alloys show that the increase in solute content causes an increase in grain density and in the solid fraction at the point of dendritic coherence, as well as a decrease in the values of the grain growth parameters and consequently a decrease in the rate of grain growth. These results suggest a relevant change in the number, morphology, and grain growth rate, associated with the increase and possible solute segregation towards the remaining liquid during grain growth.

The results suggest that the method proposed in this work can determine grain growth parameters that acceptably model experimental cooling curves and the grain growth kinetics of eutectic and hypoeutectic alloys.

CAPÍTULO 1 ANTECEDENTES

En este capítulo se presentan los aspectos más generales asociados con el modelado de la formación de microestructura de solidificación, explicando las principales aproximaciones que se han desarrollado a este respecto y con especial atención al modelado de microestructura en piezas de interés industrial. En vista de que los modelos acoplados celular autómatas –elemento finito (CAFE) se han aplicado con relativo éxito en la simulación de estructuras de solidificación en piezas de fundición, de lingotes de colada continua, en microestructuras resultantes de procesos de soldadura y de aleaciones solidificadas mediante otros procesos, se presenta el estado del arte en predicción de microestructuras de solidificación haciendo especial énfasis en los modelos de crecimiento dendrítico utilizados, dada la importancia de estos en la obtención de una simulación microestructural cercana a la realidad experimental. Posteriormente se mencionan los aspectos más relevantes del modelado de la nucleación, así como del crecimiento eutéctico y las metodologías que han sido propuestas para determinar experimentalmente los parámetros de crecimiento de grano eutéctico. Finalmente se mencionan los aspectos básicos asociados al modelado del crecimiento dendrítico, así como al modelo multicomponente, que es empleado para la validación de los parámetros de crecimiento de grano generados por el método propuesto en este trabajo.

1.1 Modelado de la formación de microestructura de solidificación.

Alrededor de mil millones de toneladas de materiales metálicos son solidificados anualmente en el mundo, sus aplicaciones son diversas, desde productos semiterminados, colados continuos o productos de fundición, entre otros [1].

La solidificación es inherente a los procesos de fabricación de diversas aleaciones y durante ésta, la microestructura sólida se forma afectando directamente las propiedades del producto solidificado, ya que las características microestructurales dictan el comportamiento mecánico que presentan estos materiales durante su desempeño. Por lo anterior es necesario estudiar y simular la formación de microestructura durante esta transformación de fase para entender y controlar el proceso de solidificación en sus diferentes variantes [2].

Por ejemplo, en las últimas décadas el interés de la industria por la simulación de la solidificación de piezas, especialmente en la industria de la fundición ha aumentado significativamente existiendo tres razones principales de este creciente interés: (i) la necesidad de mejorar la productividad y la calidad de productos fundidos, (ii) para acelerar el proceso de diseño, y (iii) para investigar la influencia de diferentes parámetros del proceso sin la necesidad de costosos ensayos experimentales [3].

El propósito de softwares comerciales enfocados a la simulación de la solidificación es el permitir un diseño, simulación e implementación de procesos de obtención de productos solidificados, en un tiempo reducido con menor costo en recursos materiales y sobre todo capital humano, obteniendo productos con mayor calidad en propiedades mecánicas y a un menor costo de producción. Cabe señalar que en muchos sectores industriales se siguen desarrollando prototipos de manera experimental únicamente, mediante un proceso de prueba y error, representando un alto costo [4] y haciendo más clara la necesidad de

incorporar el empleo de softwares comerciales como Procast ® y Magmasoft ® a sus procesos productivos.

Raffi *et al.* [5] expusieron que la solidificación tiene la influencia de fenómenos a múltiples escalas, haciéndola altamente compleja, ya que combina operaciones y leyes de diversas disciplinas de las ciencias físicas como: materia condensada, mecánica clásica, dinámica de fluidos y la termodinámica. Stefanescu *et al.* [1], propusieron abordar fenómenos a cada escala para su mayor entendimiento: nano, micro, meso y a macro escala, siendo la comprensión de los fenómenos que ocurren a escalas menores un requisito para aumentar la capacidad de predecir y controlar la evolución de las propiedades en productos solidificados.

Nakajima *et al.* [6] mencionan que el propósito básico al simular la solidificación es el generar una descripción temporal y espacial del movimiento de la interfase sólido-líquido (S/L), que en consecuencia se puede predecir la microestructura de solidificación, relacionada directamente con las cualidades del producto y las propiedades del material solidificado. Al simular los fenómenos de solidificación se pueden considerar cuatro escalas de longitud como se muestra en la **Figura 1.1**.

Modelos utilizados para la simulación.	Transporte estándar o macroscópico.	Autómata Celular y Elemento Finito (CAFE)		Dinámica molecular
Modelos de perfil de fase (PFM)				
Escala	Macroscópica (mm a m)	Mesoscópica (μm a cm)	Microscópica (nm a μm)	Atómica (~nm)
Fenómenos	Macrosegregación, rechupes, fisuras.	Estructura de colada, morfología dendrítica, microsegregación, transformación (eutéctica, peritética) ...	Morfología de grano (tipo dendrítica, tipo de fase), microsegregación (precipitación), transformación (eutéctica, peritética) ...	Nucleación, energías interfaciales.

Figura 1.1 Escalas de longitud para la simulación de la solidificación [6].

En la **Figura 1.1** se describen los modelos que son comúnmente utilizados para simulaciones de la solidificación a cierta escala de longitud y los fenómenos que son considerados. Hay que remarcar que, a pesar de la distinción utilizada en esta figura, los modelos involucran una combinación de fenómenos a diferentes escalas. En esta figura los modelos de transporte estándar o macroscópico se refieren en esencia al modelado del flujo de fluidos y transferencia de calor y de soluto, CAFE se refiere a modelos del tipo celular automático (CA) acoplados con modelos macroscópicos de elemento finito (FE) y PFM se refiere al modelado de campo de fase (phase field modeling).

Los primeros modelos planteados fueron los deterministas, basados en la solución de las ecuaciones de conservación, desarrollados por primera vez para la descripción de la nucleación y crecimiento de granos equiaxiales en procesos de solidificación [7]. Sin embargo, en los enfoques deterministas, es necesario especificar el tipo (equiaxial o columnar) y forma de grano (esferas o cilindros). En consecuencia, los modelos deterministas generalmente arrojan una aproximación de la posición del frente de solidificación con el tiempo, sin embargo, son incapaces de generar microestructuras de aspecto realista.

Para obtener un mayor acercamiento a las morfologías que presentan los granos en la realidad, sobre todo a escala mesoscópica, se propusieron los modelos estocásticos (basados en probabilidades) cuyo primer enfoque fue propuesto por Brown y Spittle [8], quienes utilizaron el método Montecarlo (MC). Este enfoque buscó predecir la recrystalización y el crecimiento de granos en la transformación de fase en estado sólido, así como para simular estructuras que se obtienen de la solidificación. Uno de los inconvenientes del método MC es que no integra explícitamente la cinética de crecimiento de la interfaz sólido-líquido. Además, el paso de tiempo implementado en MC no está correlacionado con el tiempo real. En consecuencia, es incapaz de simular la evolución temporal de las estructuras de solidificación.

Rappaz y Gandin [9] fueron los primeros en aplicar otro método estocástico, la técnica del autómatas celular o Cellular automaton (CA), para predecir las estructuras de los granos de solidificación. Este método se basa en la implementación de mecanismos físicos de nucleación, cinética de crecimiento y orientaciones cristalográficas. Además, los mecanismos de crecimiento están directamente integrados en el CA, por lo que, la simulación puede calcular cuantitativamente la evolución de la microestructura, identificando formas, tamaños y tipo de microestructuras.

Gandin *et al.* [9] aplicaron el CA para un nivel mesoscópico buscando determinar la transición columnar-equiaxial o “columnar-equiaxed-transition” (CET), posteriormente diversos autores agregaron más detalles microscópicos [10, 11, 12, 13], logrando describir y graficar características morfológicas de los granos.

La **Figura 1.2** muestra un ejemplo de aplicación del modelo CA sobre la aleación aluminio con 5% en peso de magnesio obtenido por Zyska *et al* [11], se puede observar un buen acercamiento entre el resultado obtenido por el modelo CA (**Figura 1.2 a**) y la microestructura experimental (**Figura 1.2 b**).

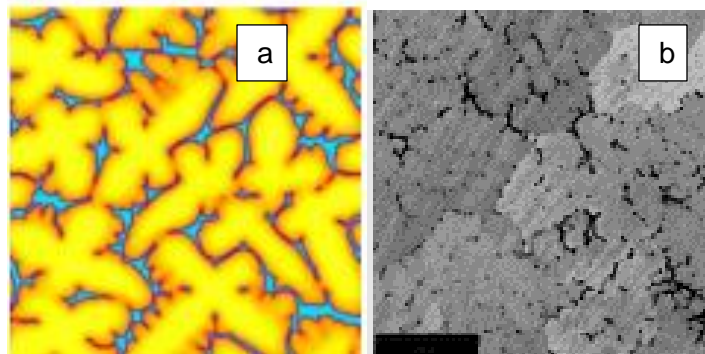


Figura 1.2 Crecimiento dendrítico equiaxial, a) obtenido por CA y b) obtenido experimentalmente, Aleación Al-Mg 5% [11].

Sin embargo, la velocidad de crecimiento en el modelo clásico de CA solo hace referencia a la temperatura local en una región en solidificación para una composición de aleación fija. Por lo tanto, los granos no interactúan directamente hasta que se tocan entre sí y no puede describir fenómenos detallados, como la formación de segundas fases [14].

Por otro lado, los modelos de campo de fase, (PFM, phase field modeling) son una herramienta computacional para simular procesos de evolución microestructural durante fenómenos de transformación de fase [15, 16, 17]. Kobayashi *et al* [18, 19, 20] fueron los

pioneros al modelar las estructuras dendríticas. El modelo PFM se ha aplicado para la simulación de una variedad de procesos de evolución microestructural durante la solidificación en muchos sistemas como en la solidificación monofásica para sistemas de sustancias puras y aleaciones binarias [21, 22, 23], en el proceso de solidificación para sistemas de aleación multicomponente y multifásica [24, 25, 26], mecánica de fracturas [27], y fragilización por hidrógeno [28].

Un modelo de campo de fase (PFM) es un modelo matemático para resolver problemas interfaciales. En este enfoque, el límite entre las fases se aproxima con una interfaz difusa introduciendo un campo de fase (PFM) como una variable continua, que es constante en la mayor parte de las fases y varía a través de la delgada capa límite entre ellos. Los modelos PFM están ligados a la termodinámica a través de la función de energía libre y otros variables relevantes, por ejemplo, temperatura y concentración de soluto. La minimización de la función de energía libre produce un conjunto de ecuaciones diferenciales no lineales parciales que gobiernan la evolución de las interfaces [29], el transporte de calor y masa, constituyendo un modelo de interfaz [30].

En los modelos PFM la evolución microestructural está impulsada por una reducción de la energía libre del sistema, es decir, una reducción de la energía libre total para las transformaciones de fase, una reducción de la energía interfacial para el engrosamiento o el crecimiento de granos, y a menudo una combinación sutil de ambos, permitiendo acoplar una amplia gama de fenómenos distintos en un marco consistente [31].

Las variables que se estiman para la solidificación se derivan de principios termodinámicos y cinéticos generales, como consecuencia, las propiedades específicas del material deben introducirse en el modelo a través de parámetros fenomenológicos que se determinan en función de la información experimental y teórica [32].

Las microestructuras consideradas en las simulaciones de PFM consisten típicamente en una cantidad pequeña de granos. La forma y distribución de los granos está representada por funciones que son continuas respecto al espacio y el tiempo. Dentro de los granos, las variables del campo de fase tienen valores casi constantes, que están relacionados con la estructura, orientación y composición de los granos [33].

Sin embargo, los modelos de campo de fase se limitan actualmente a la simulación cualitativa de una sola dendrita o un dominio de cálculo muy pequeño debido a la gran capacidad computacional y tiempo de cómputo que necesita. Para estudiar las interacciones de crecimiento dendrítico en presencia de muchos granos en una región en solidificación, es necesario considerar un gran dominio de cálculo, lo que es una tarea muy difícil de lograr por este método [34].

La **Figura 1.3** muestra la solución de PFM de la aleación aluminio con 25% de zinc obtenido por Gonzales *et al* [35].

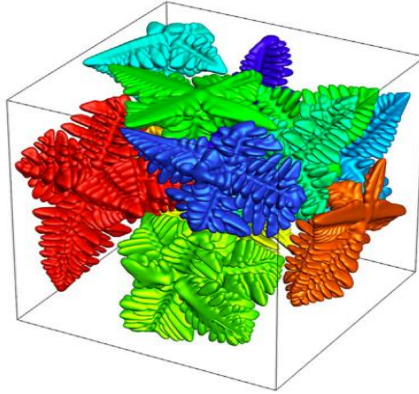


Figura 1.3 Policristales de dendritas equiaxiales obtenidas por cálculo PF en 3D [34].

En comparación, el CA y el PFM presentan resultados diferentes, ya que, CA alcanza a simular en menor tiempo una microestructura dada, aunque con menor detalle. Pineau *et al.* [36], encontraron que simular un mismo proceso para PFM necesita de 255 días, mientras que CA toma 6 horas, con el mismo procesador.

La mayoría de las aplicaciones del modelado empleando CA y PFM en términos de predicción de la formación de estructuras, se refieren al modelado local de fenómenos para áreas muy pequeñas, separadas, sin referencia a la totalidad de una pieza o lingote solidificado y su molde. Por ejemplo, PFM modela el crecimiento de cristales equiaxiales individuales o, como máximo, un grupo de varios cristales (dendritas) en su mayoría en forma bidimensional, sin referencia a las condiciones reales del proceso, que es una condición necesaria para las aplicaciones industriales.

Se han desarrollado otros métodos para permitir la simulación de grandes cantidades de granos como los presentes en piezas y lingotes de dimensiones industriales, en tiempos razonables. Uno de estos métodos es la técnica CA acoplada con el método numérico de elementos finitos (FE), el llamado método CAFE. Este método se aproxima en forma iterativa y su capacidad de simular el comportamiento experimental depende de utilizar propiedades que representen al sistema experimental en forma precisa. Este método fue desarrollado por investigadores de la Ecole Polytechnique Federale de Lausanne [37].

El método CAFE consiste, en esencia, en una discretización primaria de la pieza cuya solidificación se simula, para el modelado de transferencia de calor por el método de elementos finitos (FE) (modelo macro) y la existencia de una discretización secundaria del espacio de la pieza con la formación de celdas con muy reducidas dimensiones del orden de 10^{-4} a 10^{-6} metros, donde se modelan los fenómenos de formación de microestructura utilizando un micromodelo del tipo celular autómatas (CA).

Gandin *et al.* [38] expusieron que el principio de este acoplamiento parte del hecho de que la cinética de crecimiento de los granos depende de la temperatura, y a su vez la temperatura depende de la fracción del sólido formado, debido al calor latente liberado durante el cambio de fase.

De acuerdo con lo anterior el modelado CAFE se compone principalmente de tres elementos principales: un modelo macroscópico de transferencia de calor y flujo de fluidos, un modelo de nucleación heterogénea y un modelo de cinética de crecimiento de la punta dendrítica. Durante el proceso de solidificación, el campo de temperatura es calculado

mediante el modelo de transferencia de calor, y luego basado en los modelos de nucleación heterogénea y de cinética de crecimiento de la punta dendrítica, se simula la evolución de la microestructura de solidificación.

La **Figura 1.4** muestra un ejemplo obtenido de la aplicación del método CAFE, desarrollado por Carazani *et al* [37], aplicado a una aleación de estaño con 3% de plomo.

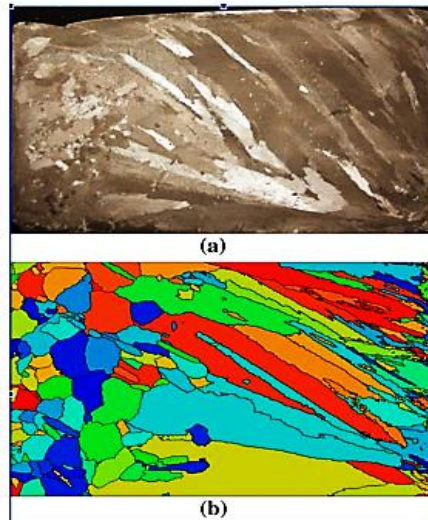


Figura 1.4 Microestructura de Sn-3Pb enfriada por el lado derecho; a) metalografía, b) simulación obtenida con el método CAFE 3D. Tamaño 100x60x10 mm. [37].

1.2 Modelos de crecimiento dendrítico empleados por modelos autómatas celular- elemento finito (CAFE).

En los últimos años el modelado CAFE ha sido aplicado con éxito en el estudio de diferentes aspectos de interés industrial e ingenieril relacionados con la simulación de la microestructura de solidificación asociada con los procesos de fundición de piezas coladas en moldes de arena y moldes metálicos, colada continua y semicontinua de metales y aleaciones ferrosas y no ferrosas, soldadura e incluso manufactura aditiva.

Uno de los elementos más importantes para una adecuada simulación de la estructura de solidificación mediante CAFE es el modelo de la cinética de crecimiento de la punta dendrítica, el cual ha sido simulado principalmente empleando las aproximaciones de los modelos Lipton-Glicksman-Kurz, LGK [39] y Kurz-Giovanola-Trivedi, KGT [40].

En la **Tabla 1.1** se muestra un resumen de modelos de crecimiento de punta dendrítica que han sido utilizados muy recientemente para simular con modelos CAFE la formación de microestructura de solidificación, donde se relaciona la velocidad de avance de la punta dendrítica (V) con el subenfriamiento (ΔT), se presentan parámetros propios de cada material identificados como μ , n que son valores numéricos que presenta cada autor.

A continuación, se detallan los trabajos asociados con los modelos cinéticos de crecimiento dendrítico enlistados en la **Tabla 1.1** y su aplicación a través de modelado CAFE para simular la estructura de solidificación.

Tabla 1.1 Ejemplos de aplicación de los modelos KGT y LGK

Aleación	Proceso	Modelo	Ecuación	Referencia
Acero 26CrMoVTiB	Colada Continua	KGT	$V = 7.51 \times 10^{-6} \Delta T^3$	Zhai <i>et al</i> , 2019 [41].
Acero GCr15	Colada Continua	KGT	$V = 4.59 \times 10^{-6} \Delta T^3$	An <i>et al</i> , 2020 [42].
Ag28Cu1Ni	Colada Continua	KGT	$V = 2.14 \times 10^{-6} \Delta T^2 + 1.11 \times 10^{-7} \Delta T^3$	Fang <i>et al</i> , 2020 [43].
Cobre	Colada semi continua	KGT	$V = \mu_1 \Delta T^2 + \mu_2 \Delta T^3$	Jia <i>et al</i> , 2020 [44].
Al-6%Cu	Colada semi continua	LGK	$V = \mu \Delta T^n$	Chen <i>et al</i> . 2019 [45].
Acero	ESR	LGK	$V = \mu \Delta T^n$	Shi <i>et al</i> , 2022 [46]
Acero 316 L	Soldadura por arco	LGK	$V = 1.0 \times 10^{-7} \Delta T^2$	Chen <i>et al</i> , 2016 [47].
Al7SiMg	Haz Laser	KGT	$V = 1 \times 10^{-4} \Delta T^3$	Hajkowski <i>et al</i> , 2019 [48].
Acero 316 L	Manufactura Aditiva	LGK	$V = \mu \Delta T^{2.5}$	Teferra y Rowenhorst, 2021 [49].
Sn-3%Pb	Colada en Molde metálico	LGK	$V = \mu \Delta T^n$	Chen y Shen, 2019 [50].
Acero 316 L	Soldadura por arco	KGT	$V = 1.8 \times 10^{-6} \Delta T^{2.7}$	Xue <i>et al</i> , 2021 [51].
AlSi7Mg	Colada en molde de arena y molde metálico con enfriador	KGT	$V = \mu_3 \Delta T^2 + \mu_4 \Delta T^3$	Hajkowski <i>et al</i> , 2021 [52].

Zhai *et al* [41] desarrollaron un modelo acoplado CAFE para estudiar los cambios en la microestructura de lingotes de acero 26CrMoVTiB de sección transversal circular obtenidos mediante colada continua, para optimizar su producción en planta industrial. En este estudio, se definieron los rangos tentativos de condiciones de producción, simulando bajo diferentes condiciones de producción, la estructura de solidificación de lingotes de acero producidos por colada continua, a partir de los resultados de las simulaciones del modelo CAFE, que mostraron que tanto el grado de sobrecalentamiento como la intensidad del enfriamiento secundario afectaban la proporción de cristales equiaxiales, el número de granos y el radio de grano promedio afectando en gran medida la estructura de solidificación en el lingote final. Con base en estas simulaciones se establecieron esquemas óptimos para mejorar la calidad de los lingotes de acuerdo con la experiencia en planta industrial. Finalmente, y con base en los resultados microestructurales obtenidos de lingotes producidos, los parámetros óptimos fueron un sobrecalentamiento de 25 °C, una velocidad de colada de 2.1 m/min, con un caudal de agua de 0.35 L/min. Cuando se adoptaron estos parámetros de proceso, los lingotes producidos en acero 26CrMoVTiB mostraron una pequeña contracción central y una proporción de cristales equiaxiales del 45.2 %. Los autores discutieron que su trabajo podía verse como un caso efectivo de simulación sirviendo de guía práctica para procesos de producción, ya que los resultados de la simulación ordenaron el establecimiento de esquemas óptimos.

An *et al* [42] propusieron un modelo CAFE para evaluar el espaciamiento dendrítico secundario (secondary dendrite arm space “SDAS”) estudiando el comportamiento evolutivo de la macroestructura en una sección transversal de un lingote de acero con 15% de cromo obtenido por colada continua. Basado en simulación numérica y en experimentos, investigaron los efectos de los parámetros de proceso sobre la segregación central del lingote, la proporción de cristales equiaxiados (equiaxed crystal rate ECR) y el SDAS. Encontraron que el aumento del ECR y la disminución de SDAS se producen con la disminución del sobrecalentamiento y con el aumento de la intensidad de agitación

electromagnética en el molde (M-EMS). Los resultados revelan que la M-EMS y el sobrecalentamiento exhiben un efecto significativo sobre el ECR, mientras que la velocidad de solidificación afecta evidentemente más al SDAS que al sobrecalentamiento. Además, la velocidad de solidificación tiene una influencia en la región del lingote que solidifica al final, lo que está estrechamente relacionado con la implementación de la agitación electromagnética final (F-EMS). Finalmente encontraron que usando sobrecalentamientos menores de 25 °C y una velocidad de solidificación de 0.8 m min⁻¹ con M+ F-EMS (mould and final electromagnetic Stirring) optimizado, el ECR aumenta en un 11% y el SDAS se refina efectivamente.

Fang *et al.* [43] analizaron, mediante experimentación y simulaciones con un modelo 3D-CAFE, la evolución de la microestructura de solidificación de lingotes de aleación con 28% de plata 1% cobre y el resto níquel, producidos mediante colada continua, estudiando el efecto del subenfriamiento de nucleación y la distancia desde el fondo del lingote hasta la sección transversal, sobre la estructura de solidificación obtenida. Además, también investigaron los efectos de la temperatura de vaciado, el coeficiente de transferencia de calor y la velocidad de tracción del lingote, sobre la estructura de solidificación. Encontraron una buena concordancia entre resultados simulados y experimentales. Los resultados muestran que la estructura de solidificación en una sección transversal de lingote consiste en cuatro zonas, incluida la región superficial de grano fino, la zona de grano columnar, la zona de transición de grano columnar a equiaxial (CET) y la región central mostrando granos equiaxiales. Se observó que a medida que la sección transversal asciende desde la parte inferior del lingote, las regiones de cristal columnar se expanden gradualmente. Además, el bajar la temperatura de vaciado, aumentar el coeficiente de transferencia de calor o aumentar la velocidad de tracción del lingote tienen un efecto beneficioso sobre el refinamiento del grano ya que, bajo las condiciones óptimas del proceso, una mayor proporción de granos equiaxiales y el tamaño de grano más fino estarán presentes en la estructura solidificada.

Jia *et al.* [44] desarrollaron un modelo acoplado CAFE para analizar la evolución de la interfase sólido/líquido y de la estructura de solidificación de un lingote de colada semicontinua de cobre de alta pureza, obtenido mediante enfriamiento directo (Direct Casting, DC) bajo diferentes condiciones de colada. Para validar al modelo se compararon sus predicciones con los resultados experimentales de la estructura de solidificación, encontrando que el modelo es efectivo para simular la estructura de solidificación de cobre de alta pureza. Posteriormente, el modelo se usó para predecir la estructura de solidificación bajo diferentes temperaturas de fundición, velocidades solidificación, y coeficientes de transferencia de calor. Encontraron que, con el aumento de la temperatura de vaciado, el tamaño de grano disminuye primero y luego aumenta.

Existe una relación entre el tamaño del grano y su uniformidad, y el tamaño del grano es más uniforme a mayor temperatura de vaciado. Con el aumento de la velocidad de solidificación, el tamaño de la interfaz sólido-líquido (S/L) aumenta, pero el número total de granos en la sección transversal del tocho disminuye gradualmente. Finalmente concluyen que para la producción de lingotes de cobre de alta pureza con grandes dimensiones de sección transversal mediante fundición DC, se podría obtener una estructura solidificada fina reduciendo apropiadamente la velocidad de enfriamiento.

Chen *et al.* [45] estudiaron el modelado de la estructura de grano y la macrosegregación durante la solidificación de lingotes de aleación Al-Cu obtenidos mediante colada semi continua. Parten del hecho de que la estructura de grano y la macrosegregación son dos aspectos importantes para evaluar la calidad de los lingotes de colada semicontinua

mediante enfriamiento directo (DC) y los fenómenos responsables de su formación interactúan fuertemente entre sí. El modelado de la estructura del grano y la macrosegregación durante la solidificación en el proceso DC se logra con un modelo CAFE. Este modelo se aplica a la fundición de Al-6.0 % Cu a escala industrial. Se obtienen lingotes cilíndricos con y sin refinador de grano. Se muestra que la estructura de grano es totalmente equiaxial en el tocho de grano refinado, mientras que una región de grano columnar fino y una región de grano columnar grueso son formados en el tocho no refinado.

Con el aumento de la velocidad de solidificación, los granos se vuelven más finos y crecen en una dirección más perpendicular al eje, y la segregación positiva cerca de la línea central se vuelve más pronunciada. El aumento de la temperatura de sobrecalentamiento hace que los granos sean más grandes y se presenta un efecto negativo de segregación más pronunciada cerca de la superficie.

Los modelos CAFE también han sido aplicados al estudio de la formación de microestructura de solidificación en otros procesos de interés metalúrgico.

Por ejemplo, Xue *et al* [51] aplicaron un modelo CAFE para simular la evolución de la estructura de grano durante la soldadura por arco de tungsteno con gas, de placas de acero 316 L. Ellos utilizaron una configuración experimental diseñada para observar *in situ* el baño de fusión y el flujo de líquido, lo cual complementaron con un análisis de difracción de retro dispersión de electrones de las muestras experimentales para revelar la textura resultante de la fusión y la solidificación. Estos autores encontraron que la forma del baño de fusión se puede reproducir muy bien para las dos velocidades de soldadura experimentadas, siempre que se ajuste adecuadamente el modelo de crecimiento dendrítico, esto es la relación entre la velocidad de crecimiento de la punta de la dendrita y el subenfriamiento. Como resultado de estos ajustes, la estructura de grano calculada alcanza un buen acuerdo con las medidas experimentalmente en términos de morfología, orientación y textura. Una de sus conclusiones principales es el hecho de que un modelo de cinética de crecimiento dendrítico estándar provoca que se reduzca el baño de fusión y da como resultado una gran desviación de la estructura de grano simulada con respecto a las mediciones. La ley de cinética de crecimiento es de primordial importancia para la predicción cuantitativa de la estructura del grano, y en el caso de investigaciones sobre solidificación asociada con soldadura debe incluir fenómenos de solidificación rápida y comparación con resultados experimentales.

Hajkowski *et al* [52] exploraron el efecto de variar los parámetros existentes en la base de datos del software Calcosoft CAFE para mejorar la predicción de la estructura de solidificación de una pieza cilíndrica de aleación Al7SiMg colada en moldes de arena y aislante en presencia y ausencia de un enfriador metálico en la base de la pieza, específicamente la transición CET. El objetivo fue el variar los parámetros térmicos y cinéticos de solidificación, con el propósito de lograr la simulación microestructural de transición CET y de tamaños de grano más cercanos y capaz de reproducir la microestructura experimental. Como resultado de su análisis encontraron que las bases de datos disponibles en softwares que permiten el planteamiento de modelado CAFE para simular microestructuras de solidificación como Calcosoft®, Procast® y Magmasoft® son muy pobres y con capacidad muy limitada para lograr predicciones microestructurales cercanas a la realidad experimental y propusieron su estrategia para ajustar los valores de parámetros empleados en las simulaciones, poniendo un especial cuidado y atención en los parámetros más críticos entre los que se encontraron los parámetros de nucleación y de crecimiento de grano.

De hecho, ha sido publicado que la precisión de la simulación de solidificación de piezas de fundición empleando software comercial como Procast® o Magmasoft® depende en gran medida de la calidad de las propiedades físicas y termofísicas proporcionadas por la base de datos del software. Las bases de datos disponibles y utilizados actualmente por software de simulación comercial incluyen propiedades sólo para unas pocas aleaciones estándar seleccionadas. En el caso de aleaciones más sofisticadas con diferentes composiciones químicas, tratamientos de refinamiento y / o modificación, el análisis térmico (TA) puede ser una herramienta muy útil para recopilar parámetros faltantes o datos termofísicos más precisos para las aleaciones investigadas [53, 54].

En forma paralela es necesario desarrollar herramientas experimentales que permitan extraer *in situ* información relacionada con la solidificación de aleaciones específicas, con mediciones realizadas en condiciones controladas (parámetros térmicos, entalpías, modelos de crecimiento de grano, evolución de fracción sólida, etc.) [55].

En este sentido es necesario el desarrollo de metodologías teórico-experimentales sistematizadas que permitan obtener, así como validar modelos de nucleación y crecimiento de grano bajo condiciones controladas, que faciliten su empleo y que puedan ser utilizados en diversos sistemas de aleación [56].

En este proyecto se desarrolla y valida una metodología experimental para determinar parámetros cinéticos de crecimiento de grano con el propósito final de desarrollar una herramienta para mejorar las predicciones de microestructura de solidificación por metodologías como la empleada en modelos CAFE.

1.3 Nucleación y crecimiento de grano durante la solidificación

La evaluación de las leyes que rigen la nucleación sirve para determinar la densidad de granos que presentará un producto de solidificación. Para ello, se distinguen dos aproximaciones principales [57]:

1. Modelos de nucleación continua.
En este tipo de modelos se considera una dependencia continua del número de núcleos activos por unidad de volumen de metal (N_v).
2. Modelos de nucleación instantánea. Estos modelos consideran que todos los núcleos se forman en el momento en que el líquido subenfriado alcanza la temperatura de nucleación (T_n).

En la **Figura 1.5** se muestra una representación esquemática de la nucleación y el valor N en función del subenfriamiento, tanto para la nucleación continua como instantánea.

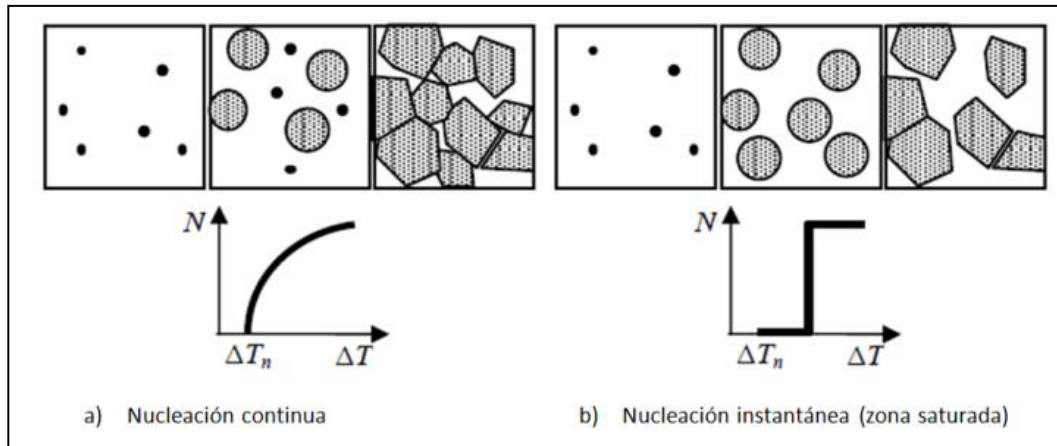


Figura 1.5 Esquema y evolución densidad de núcleos contra subenfriamiento de los tipos de nucleación [1].

Una vez generada la nucleación, el crecimiento es determinante para la cinética de solidificación. Durante este proceso la evolución de la interfaz sólido-líquido se ve modificada morfológicamente en la siguiente secuencia de perfiles respecto a la velocidad de crecimiento (V): planos, celulares, celulares-dendríticos y dendríticos. Las morfologías también se ven afectadas por el gradiente térmico (G) que presenta la secuencia: planos, celulares, dendríticos. La concentración de un elemento aleante provoca un efecto considerable en las morfologías. Al incrementarse se tendrá mayor posibilidad de modificar V y G para obtener distintos resultados. En la **Figura 1.6** se muestra un esquema de lo que ocurre al modificar la concentración, V y G .

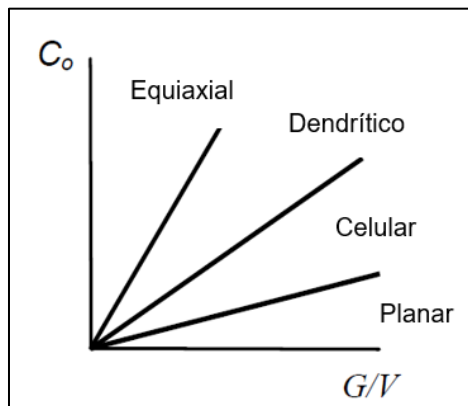


Figura 1.6 Influencia de la composición, gradiente térmico y velocidad de crecimiento sobre la morfología [1].

En la mayoría de los procesos industrializados existen dos casos generales de formación de microestructura que son básicamente diferentes: la formación de microestructura columnar y equiaxial, cada una de las cuales puede ser eutéctica y/o dendrítica. Los modelos más recientes de la transición columnar/equiaxial explican que dicha transición se presenta bajo el efecto de un bloqueo mecánico o solutal que se alcanza cuando la fracción de granos equiaxiales presentes en el frente de solidificación columnar alcanza un valor crítico con respecto al subenfriamiento presente ΔT en el frente columnar.

La **Figura 1.7** muestra un esquema, desarrollado por Martorano *et al* [58], quienes propusieron un modelo para explicar la transición columnar/equiaxial con base en las siguientes suposiciones simplificativas: (a) solidificación unidireccional en estado estacionario de granos equiaxiales y columnares para un sistema de referencia que se mueve a la velocidad constante V de las isoterma; (b) variación lineal de la temperatura con distancia (ver perfil T); (c) convección insignificante del líquido y movimiento nulo de granos equiaxiales; (d) granos equiaxiales esféricos; (e) nucleación heterogénea de granos equiaxiales sobre sustratos preexistentes y (f) distribución normal (gausiana) de subenfriamiento de nucleación. El sistema de solidificación se ilustra en la **Figura 1.7** donde se describe el crecimiento tanto columnar como equiaxial, aunque solo un tipo de crecimiento prevalece en condiciones de estado estacionario. También se muestra la fracción extendida de granos equiaxiales ε_g

El crecimiento columnar y equiaxial se superponen al perfil de temperatura lineal T (**Figura 1.7**) y, si la fracción de volumen de granos equiaxiales al subenfriamiento presente en el frente columnar, ε_g es mayor que una fracción de bloqueo predeterminada, el crecimiento equiaxial prevalece. De lo contrario, dominan los granos columnares. Esta suposición implica el bloqueo mecánico del frente columnar. Los modelos matemáticos han predicho que tanto el bloqueo mecánico como el solutal del frente columnar producen resultados similares en la mayoría de las condiciones de solidificación.

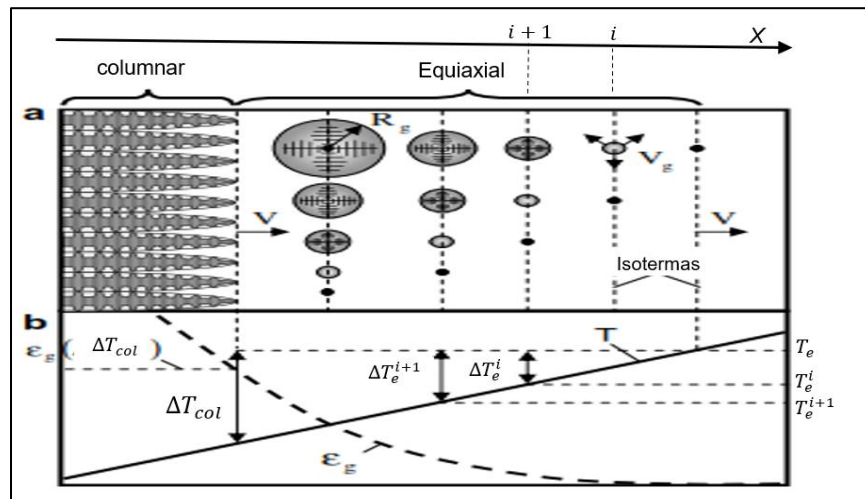


Figura 1.7 Esquema de la relación de temperatura, posición y tipo de grano durante la solidificación [64].

La estructura de grano también depende de la velocidad de enfriamiento [59]. A modo de ejemplo, esto se ilustra en la **Figura 1.8** con el mapa de estructuras sólidas para aleaciones de aluminio, desarrollado por Hagelcocher *et al* [60, 61]. La línea verde representa la relación constante $G/V = 1450 \text{ } ^\circ\text{C s mm}^{-2}$ que marca la transición de una solidificación no dendrítica a una solidificación dendrítica orientada de aleaciones de aluminio AA6016. A tasas de solidificaciones muy altas (10 mm s^{-1}) en estas aleaciones de aluminio se solidifican principalmente con proporciones más pequeñas que G/V y, por lo tanto, la estructura de grano resultante consiste en granos dendríticos. La línea azul representa la relación constante $G/V_{eq} = 3 \pm 0.5 \text{ } ^\circ\text{C s mm}^{-2}$, que marca la transición de una estructura de grano dendrítica orientada a una estructura de grano equiaxial dendrítica.

Por lo tanto, la relación G/V define el modo de solidificación [59], ver flecha gris oscura de la **Figura 1.8**.

La velocidad de enfriamiento ($\dot{T} = \frac{dT}{dt}$) resulta de la multiplicación del gradiente de temperatura G con la velocidad de solidificación V . Un aumento de la tasa de enfriamiento conduce a un aumento de la nucleación, es decir, en una disminución del tamaño de grano [62, 63]. De ahí el producto ($G * V$) define el tamaño de los granos, correspondiente al refinamiento de la estructura resultante, como se ilustra en la flecha gris claro en la **Figura 1.8**.

En el caso del crecimiento equiaxial dendrítico, los granos en desarrollo son parcialmente sólidos, mientras que en el equiaxial eutéctico son totalmente sólidos. Usualmente para ambos casos (dendrítico y eutéctico), la rapidez de crecimiento es calculada en función del subenfriamiento [58, 63, 64].

$$V = \frac{dR}{dt} = \mu \Delta T^n \quad (1.1)$$

En la **Ecuación 1.1** R es el radio del grano, t es el tiempo, dR/dt es la rapidez de crecimiento de grano, ΔT es el subenfriamiento, μ y n son los parámetros cinéticos de crecimiento de grano, pre-exponencial y exponencial, respectivamente.

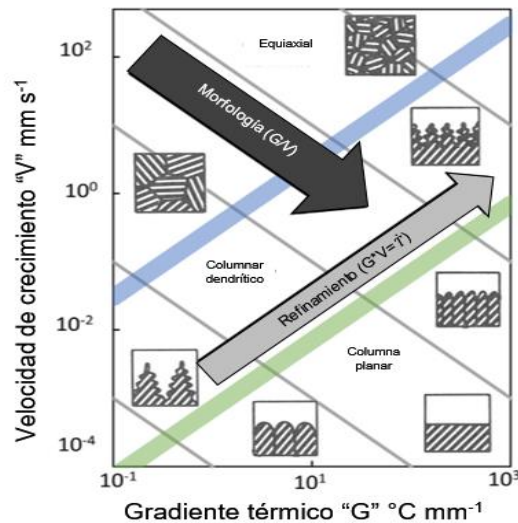


Figura 1.8 Mapa de estructuras obtenidas de la solidificación. Los esquemas muestran la estructura de grano resultante [66].

La base teórica que fundamenta la **Ecuación 1.1** parte de la termodinámica de la solidificación (ver **Anexo I**).

El uso de la **Ecuación 1.1** es implementado como base en distintas investigaciones que buscan simular la solidificación. La **Tabla 1.3** muestra un compendio de métodos, materiales y sus referencias, del estado del arte sobre el uso de esta ecuación en acoplamiento con los métodos tipo CA y CAFE, es de recalcar que se aplicó a diferentes materiales.

Tabla 1.2 Relación de métodos, materiales y variaciones de la ecuación 1.1, implementados recientemente con los métodos CA, CAFE y PFM.

Método de análisis aplicado	Material	Ecuación	Referencia
CA	Succionitrilo	$V = \mu \Delta T^2$	Chen <i>et al.</i> 2016 [47]
CAFE	Al-7 Si	$V = \mu(\Delta T)^n$	Chen y Shen, 2019 [50], Hajkowski <i>et al.</i> 2021 [52]
CAFE	Cobre pureza comercial	$V = \mu_1 \Delta T^2 + \mu_2 \Delta T^3$	Xue <i>et al.</i> 2021 [51]
CAFE	Al- 7 Si	$V = \mu \Delta T^n$	Hu <i>et al.</i> 2018 [54]
CAFE y PFM	Succionitrilo	$V = \mu \Delta T^n$	Furtato <i>et al.</i> 2017 [55]

En este trabajo se propone una nueva metodología experimental que permite determinar, a partir del procesamiento numérico de curvas de enfriamiento y de determinaciones metalográficas de densidad de grano, los parámetros μ y n para granos equiaxiales de los eutécticos Al-Si, Al-Ni y Al-Cu solidificados a tres velocidades de enfriamiento diferentes, así como para tres aleaciones hipoeutécticas del sistema Al-Cu con 3,4 y 5% en peso de Cu solidificadas bajo condiciones similares de velocidad de enfriamiento.

1.4 Crecimiento eutéctico

Las aleaciones eutécticas son conocidas por ser la combinación de dos o más elementos que presentan una temperatura de fusión inferior a la de sus aleantes puros, además de propiedades mecánicas generalmente mayores a las presentadas por éstos [65, 66].

Hunt y Jackson clasificaron a los eutécticos respecto a la cinética de la interfase entre los componentes [67], clasificándolos en función de su morfología y de presentar un crecimiento regular o irregular:

Cuando las fases que forman al microconstituyente eutéctico son no facetadas/ no facetado se trata de eutécticos regulares en donde existe esencialmente una orientación regular entre las dos fases. Cuando las fases que forman al microconstituyente eutéctico son no facetadas/ facetado se trata de eutécticos irregulares en donde se presentan regiones de orientación aleatoria entre las dos fases.

De manera general la morfología que pueden presentar los eutécticos depende de la proporción en la cantidad de las fases que lo forman. Cuando el cociente entre las fracciones de las dos fases que constituyen al eutéctico son menores a 0.28, el eutéctico muestra una morfología fibrosa. Cuando ese cociente presenta un valor cercano a 0.5, la morfología que presenta es laminar

Como ejemplos de los sistemas de aleación que presentan eutécticos regulares está el sistema aluminio-cobre y el crecimiento de granos eutécticos Al-Cu se estudian en este trabajo. En el caso de los eutécticos irregulares se tienen a los sistemas Al-Si y Al-Ni, en este trabajo también se estudia el crecimiento de granos eutécticos en esos dos sistemas.

La **Figura 1.9** muestra los ejemplos de las microestructuras de los eutécticos regulares (**Figura 1.9 a**) e irregulares (**Figura 1.9 b**). La **Figura 1.9 a** corresponde a la aleación Al-Cu eutéctica donde es visible un patrón regular de ambos microconstituyentes. La **Figura 1.9 b** pertenece a la aleación Au-Sn20 donde se muestra que la orientación de los microconstituyentes es irregular.

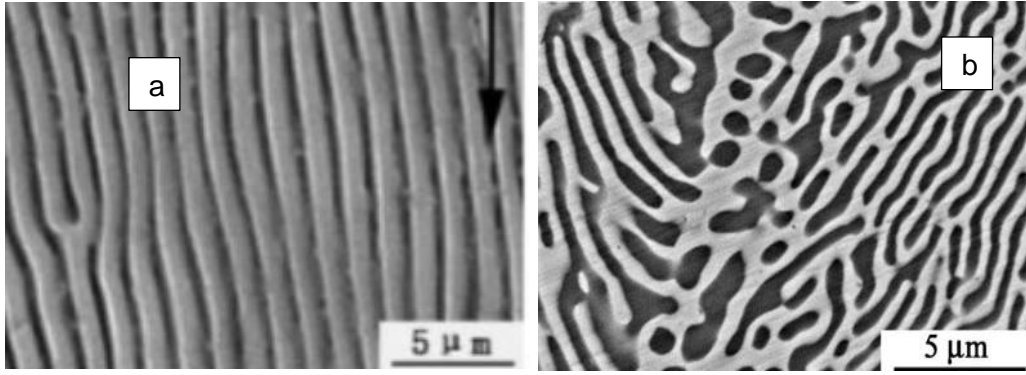


Figura 1.9 Microestructuras de eutécticos, (a) regulares [68] y (b) irregulares [69].

Los eutécticos regulares e irregulares laminares se caracterizan por el espaciamiento entre las fases, llamado espacio interlaminar. Para los eutécticos irregulares ambas fases pueden crecer en forma convergente (uno hacia el otro) o divergente presentando un espaciamiento mínimo y otro máximo característicos, para determinar el espaciamiento interlaminar se toma el promedio de las separaciones. El espaciamiento interlaminar es determinado por una relación entre dos factores opuestos: la difusión de solutos que tiende a disminuirlo y la energía interfacial que tiende a aumentarlo.

Las variables involucradas en la solidificación eutéctica regular son el subenfriamiento ΔT , la velocidad de avance del frente eutéctico V y el espacio interlaminar λ . Las condiciones de crecimiento del frente eutéctico corresponden al criterio extremo (CE) [67], donde la solidificación queda en función de efectos de tensión interfacial, también llamados efectos capilares y los efectos de la concentración o efectos constitucionales: $\Delta T = \Delta T_r + \Delta T_c = \frac{2\Gamma}{r} - m_L(C_L^* - C_o)$, siendo $r = cte * \lambda$, $\Delta T_r = \mu_r \lambda^{-1}$ donde μ_r es una constante que depende del material o curvatura de la lámina, dado que la composición es función de la distancia entre laminas $\Delta C = cte \lambda V$ considerando al enfriamiento constitucional como $\Delta T_c = \mu_c \lambda V$, el sobre-enfriamiento es definido por:

$$\Delta T = \frac{\mu_r}{\lambda} + \mu_c \lambda V \quad (1.2)$$

Donde $\mu_r = 2 \left(\frac{|m_\alpha| * |m_\beta|}{|m_\alpha| + |m_\beta|} \right) \left(\frac{\Gamma_\alpha * \text{sen} \theta_\alpha}{m_\alpha * f_\alpha} + \frac{\Gamma_\beta * \text{sen} \theta_\beta}{m_\beta * f_\beta} \right)$ y $\mu_c = \left(\frac{|m_\alpha| * |m_\beta|}{|m_\alpha| + |m_\beta|} \right) \frac{\Delta C * P}{D * f_\alpha * f_\beta}$; α y β corresponden a las fases que constituyen a la aleación eutéctica binaria siendo.

La **Figura 1.10** muestra el grafico obtenido de la **Ecuación 1.2**, donde se visualiza el ΔT_{ex} que es el sobre enfriamiento extremo, correspondiente al mínimo en la función y definido por $\frac{d\Delta T}{d\lambda} = 0 = \frac{d}{d\lambda} \left(\frac{\mu_r}{\lambda} + \mu_c \lambda V \right)$, obteniéndose finalmente: $\frac{\mu_r}{\lambda^2} + \mu_c V = 0$; despejando: $\lambda = \left(\frac{\mu_r}{\mu_c V} \right)^{0.5}$ y sustituyendo en la **Ecuación 1.1**, se obtiene: $\Delta T = \frac{\mu_r}{\left(\frac{\mu_r}{\mu_c V} \right)^{0.5}} + \mu_c \left(\frac{\mu_r}{\mu_c V} \right)^{0.5} V$; De donde se obtiene: $\Delta T = 2(\mu_r \mu_c)^{0.5} V^{0.5}$.

Al despejar a V , obteniendo $V = \frac{1}{4\mu_c \mu_r} \Delta T^2$ por lo cual al definir $\mu = \frac{1}{4\mu_c \mu_r}$ la ecuación que define la velocidad de avance del frente eutéctico en función del subenfriamiento es:

$$V = \mu \Delta T^2 \quad (1.3)$$

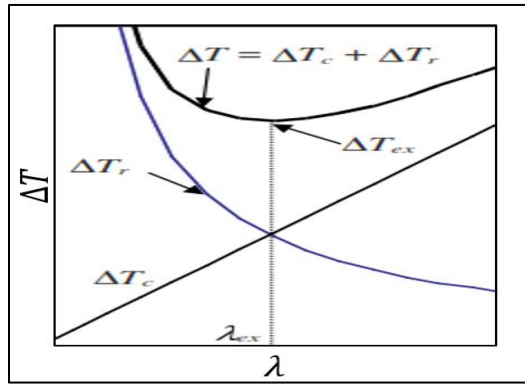


Figura 1.10 Esquema del subenfriamiento en función del espacio interlaminar, respecto al subenfriamiento constitucional y de curvatura [1].

La estructura eutéctica que involucra fases facetada /no facetada o irregular presenta un espaciado laminar que no obedece a la **Ecuación 1.3**, por lo que, el criterio extremo no explica el mecanismo que implica el espaciado laminar. Mientras que el espaciado local correspondiente a la condición del extremo se puede calcular, el espaciado medio es considerablemente mayor. Esto se debe al hecho de que en estos eutécticos la cristalografía toma diferentes direcciones de crecimiento de las dos fases.

En consecuencia, el espaciado más pequeño será el dictado por el criterio extremo, λ_{ex} , pero también existirá un espaciado más grande, dictado por la condición de “ramificación”, λ_{br} , [70].

La **Figura 1.11** corresponde a la representación de los espaciados interlaminares de un eutéctico irregular, es visible que la fase β tomará diversas direcciones que afectarán a la microestructura y escalas de longitud superiores.

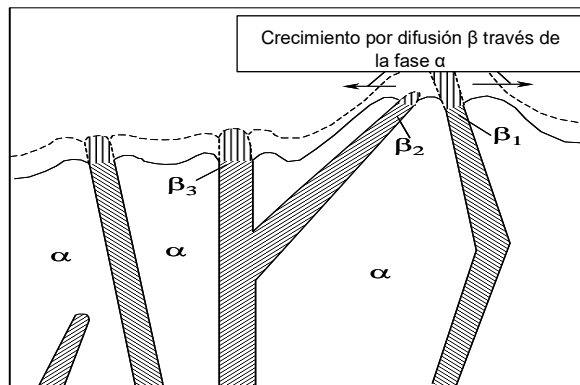


Figura 1.11 Ajuste de espaciado para el caso convergente de láminas α [71].

Fisher, Kurz y Magnin [70, 72] propusieron un modelo eutéctico facetado/no facetado irregular donde plantearon los siguientes supuestos principales:

- i) La interfaz no es isotérmica.
- ii) La fase β tiene una interfaz difusa creciendo más rápido que la fase de α facetada.
- iii) La ramificación ocurre cuando se forma una depresión en la fase facetada.

Demostraron que el espaciado más pequeño presente en el eutéctico laminar está dictado por la condición del extremo, pero que también existirá un espaciado más grande, λ_{br} , dictado por una condición de ramificación. El espaciado promedio λ se puede

calcular como el producto entre una función de las constantes físicas de la fase facetada y una constante del material, Φ . Esta constante es particular de cada material evaluado, siendo necesario obtenerla experimentalmente. El modelo predice que el espaciado medio en eutécticos con la interfaz sólido-líquido, no isotérmico obedece relaciones similares a las desarrolladas por Hunt y Jackson [67] para la interfaz isotérmica:

$$\lambda^2 V = \Phi^2 \frac{\mu_r}{\mu_c} \quad \text{o} \quad V = \Delta T^2 \left(\frac{1}{(\Phi + \frac{1}{\Phi})^2 \mu_r \mu_c} \right) \quad (1.4)$$

Donde se identifica una forma similar a la presentada por la **Ecuación 1.3**, siendo:

$$\mu = \left(\frac{1}{(\Phi + \frac{1}{\Phi})^2 \mu_r \mu_c} \right) \quad (1.5)$$

1.5 Metodologías propuestas para determinar experimentalmente los parámetros de crecimiento de grano eutéctico.

Existen reportadas en la literatura dos metodologías para determinar experimentalmente los parámetros de crecimiento de grano eutéctico.

La primera de ellas es propuesta por Degand *et al.* [73] y asume que el valor del exponente n de la **Ecuación 1.1** es igual a 2, de acuerdo con la teoría clásica de crecimiento eutéctico, partiendo de la **Ecuación 1.3** y desarrolla un procedimiento experimental para evaluar el coeficiente pre exponencial μ a partir de análisis térmicos y determinaciones de densidad de granos por unidad de volumen para la aleación eutéctica Al-Si. Estos autores despejan de la velocidad de crecimiento, el incremento en radio de grano y obtienen:

$$dR = \mu \Delta T^2 dt. \quad (1.6)$$

También asumen que los granos adoptan una geometría esférica y consideran un modelo de esferas duras que establecen que la fracción sólida que corresponde al llenado del sistema por esferas de igual radio y que se tocan entre corresponde a 0.74, ya que pertenece al coeficiente de máximo empaquetamiento de esferas. De acuerdo con lo anterior este método considera que el crecimiento de grano termina al alcanzarse una fracción sólida de 0.74 y por esto realiza el análisis desde el tiempo de inicio de la solidificación (t_{ini}) hasta que la fracción sólida sea el 74% ($f_{s0.74}$) ese tiempo se identifica como $t_{0.74}$.

Posteriormente estima que, al alcanzar el máximo empaquetamiento, el radio de grano es el promedio \bar{R} , que corresponde al radio promedio medido mediante metalografía cuantitativa. La integración de la **Ecuación 1.6** se expresa como:

$$\int_0^{\bar{R}} dR = \bar{R} = \mu \int_{t_{ini}}^{t_{0.74}} \Delta T^2 dt. \quad (1.7)$$

El parámetro pre-exponencial es determinado finalmente con la ecuación:

$$\mu = \frac{\bar{R}}{\int_{t_{ini}}^{t_{0.74}} \Delta T^2 dt} \quad (1.8)$$

La segunda metodología propuesta para determinar experimentalmente los parámetros de crecimiento de grano eutéctico es la realizada por Dioszegi y Svensson [74] quienes plantearon un método para determinar tanto a μ como a n a partir de información de la densidad de granos y la evolución de la fracción sólida empleando el método de análisis térmico de Fourier.

Esta propuesta utiliza la definición de la fracción sólida en forma exponencial correspondiente a la **Ecuación 1.9**, donde f_s^t es la fracción sólida, N es el número de granos por unidad de volumen y R^t es el radio promedio de los granos presentes en el tiempo t , considerando que al final de la solidificación existirá entre los granos un interbloqueo de su crecimiento, la fracción sólida efectiva estará dada por la ecuación de Kolmogorov-Jhonson-Mehl-Avrami (KJMA) [75].

$$f_s^t = 1 - \exp\left(-N \frac{4}{3} \pi R^t{}^3\right) \quad (1.9)$$

Se establece que, para obtener la velocidad de crecimiento de grano, se utilicen diferencias finitas hacia atrás, es decir la diferencia del radio a cierto paso de tiempo (R^t), el radio del paso anterior (R^{t-1}), y el paso de tiempo:

$$V = \frac{dR}{dt} = \frac{R^t - R^{t-1}}{\Delta t} = \mu \Delta T^n \quad (1.10)$$

Para determinar la solución de la **Ecuación 1.10** se realiza la linealización aplicando logaritmos quedando la ecuación como:

$$\log \dot{R} = \log(\mu \Delta T^n) = \log \mu + n \log \Delta T \quad (1.11)$$

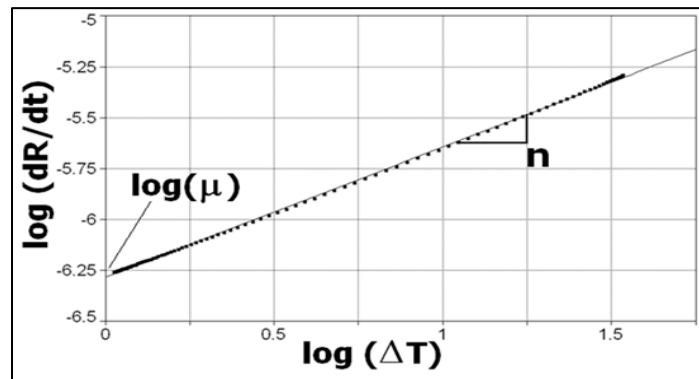


Figura 1.12 Ejemplo del gráfico implementado en el método de Dioszegi [74].

La aplicación de este método derivó en una correlación del 98% para el hierro gris, esto en el mismo artículo propuesto por Dioszegi.

Estos procedimientos experimentales tienen el potencial para determinar los coeficientes cinéticos, y es posible variar la velocidad de enfriamiento con el objeto de observar sus cambios.

1.6 Crecimiento dendrítico.

Papatreu en 1935 [76] registro las primeras propuestas que buscaban categorizar los fenómenos presentes en un sólido, respecto al proceso de solidificación, basando sus estudios en cloruro de amonio, sus observaciones plantearon un fundamento para un estudio formal.

En 1946, Ivanstov [78] dedujo las ecuaciones que rigen el desarrollo de la fase sólida durante la solidificación respecto al perfil de difusividad térmica, utilizando la geometría de un paraboloide de revolución, planteando ecuaciones que describen el subenfriamiento con el número de Péclet, sin embargo, no se definía una velocidad de crecimiento específica para cada subenfriamiento, esto debido a que genera un número infinito de soluciones.

Contemporáneo a Ivanstov, West [57] incluyó los fenómenos de capilaridad y difusión a las ecuaciones de Ivanstov, donde encontró que la relación de velocidad de crecimiento y el radio de grano presenta un valor máximo, considerado como criterio extremo, el resultado que relaciona al subenfriamiento con la velocidad de crecimiento es:

$$\Delta T = cte * V^{0.5} \quad o \quad V = \frac{1}{cte} \Delta T^2 \quad (1.12)$$

Siendo ΔT el subenfriamiento, “cte.” una constante que depende de cada material y V la velocidad de crecimiento de la fase sólida.

Los modelos anteriores no incluían efectos como la curvatura del frente de solidificación, la capilaridad, gradientes constitucionales, gradientes térmicos y cambios de presión, todos estos se presentan durante los procesos de fabricación a nivel industrial. En la década de 1960's Temkin [77] estudió los efectos capilares, Bolling y Tiller [78] observaron los gradientes térmicos presentes durante la curvatura y consideraron el perfil de soluto. Langer y Müller [29] desarrollaron el criterio de estabilidad marginal, que corresponde al mínimo de longitud de la fase solidificada respecto a un máximo subenfriamiento, validaron sus postulados experimentalmente, marcando la primera vez que se obtuvo una concordancia de la teoría con los experimentos. Esto permitió establecer los parámetros que rigen el crecimiento en las diferentes estructuras formadas durante la solidificación, permitiendo el análisis entre formaciones celulares, dendríticas, columnares y equiaxiales. Estos criterios no consideran la velocidad de enfriamiento, primordial para procesos industriales.

En 1995 Müller-Krumbhaar y Caroli [79] plantearon la teoría de solubilidad cuyo enfoque se encuentra en el análisis de la tensión interfacial entre las fases sólida y líquida durante la solidificación. Karma *et al* [80] evaluaron los efectos de impurezas, denominando teoría de micro solubilidad. Kesslet *et al* [81] tomaron una única solución, que consiste en resolver el problema de la interfaz en la punta dendrítica con perfiles de concentración y temperatura, para ello utilizaron condiciones de frontera que incluyen el efecto de la energía interfacial además de tomar en cuenta la anisotropía en la punta dendrítica.

Por ahora, las predicciones hechas por la teoría de micro solubilidad pueden verse validadas cuantitativamente por simulaciones de perfil de fase (PFM) en dos o tres dimensiones. Sin embargo, comparando con experimentos, se ven poco acercadas. Una razón es la dificultad de medir debido a la anisotropía de los sistemas metálicos, aunque los progresos en esta dirección realizados por Liu *et al* [82, 83, 84] examinando la aleación Al-Cu 4% con condiciones de difusión de solidificación controlada, muestran que la punta dendrítica sigue la teoría de micro solubilidad.

El caso de estudio de este trabajo es la formación de dendritas equiaxiales, que se forman con composiciones distintas a la eutéctica y/o con gradientes térmicos negativos. Para el estudio de estas morfologías se han realizado diversos planteamientos que consisten en dos distintos enfoques: el primero se refiere a predecir el crecimiento mediante el uso de las teorías de transporte de materia y calor, el segundo se enfoca en los fenómenos interfaciales involucrados en los cambios morfológicos que coexisten en el crecimiento dendrítico.

Los métodos utilizados para determinar la velocidad de crecimiento de los brazos primarios, también denominada velocidad de la punta dendrítica se puede dividir en tres grupos principales:

-Criterio extremo: Implica que la perturbación que crecerá a un máximo de velocidad y un mínimo de subenfriamiento [85].

-Estabilidad marginal: La perturbación crecerá con cortos estados de longitud de onda entre brazos primarios, implicando que la longitud del brazo primario es el radio de grano. Esto quiere decir que a longitudes mínimas el radio tenderá a crecer, mientras que a valores mayores de longitud el radio disminuirá o se estabilizará. Algunos desarrollos han sido de Lipton *et al* [39] el modelo LGK, Nastac y Stefanescu plantearon el modelo NS [86], entre otros.

En la **Tabla 1.4** se muestra el estado del arte de los modelos empleados para la determinación de la rapidez de crecimiento dendrítico, así como las ecuaciones, los sistemas bajo estudio, criterio empleado y la referencia.

Al observar las ecuaciones características de cada criterio es posible constatar un potencial de aplicación para un criterio global que evalúa los valores de parámetros cinéticos durante el crecimiento, para después utilizarse en la base de datos del software de predicción de la solidificación. Un modelo matemático apropiado para el estudio de crecimiento dendrítico con condiciones que definan en mayor medida el comportamiento de crecimiento debe ser reproducible experimentalmente, la naturaleza de este fenómeno sensible a diversas variables hace complicada la reproducibilidad [87].

Tabla 1.3 Estado del arte de modelos y ecuaciones empleadas para determinar la rapidez de crecimiento dendrítico.

Criterio	Modelo	Sistema bajo estudio	Ecuación	Referencia
Estabilidad marginal	Criterio extremo	Al-10%Cu	$V = \frac{4\sigma D}{d_0} (lv^{-1}(\Omega))^2$	Xu <i>et al</i> 2018 [88] y Bogno <i>et al</i> 2013 [89].
		Cu	$V = \frac{2\sigma\alpha C_p}{\Gamma\Delta H} \Delta T^2$	Tsai <i>et al</i> 2012 [90] y Wang <i>et al</i> 2021 [91].
Criterio extremo	LGK	Al-20%Cu	$V = \frac{D}{-8m(1-k)C_0\Gamma} (T_L - T_{TIP})^2$	Murphy <i>et al</i> 2013 [92] y Saoltani <i>et al</i> 2021 [93]
		Mg (AZ31)	$V = \frac{4\pi^2 D\Gamma}{\Delta T k_e R^2}$	Soboleva <i>et al</i> 2013 [94]
Microsolubilidad	Entropía máxima	SCN	$V = \frac{B_2 T - \frac{B_2 B_3 T}{R}}{1 + \frac{B_2 R}{B_1}}$	Li <i>et al</i> 2007 [95]

La **Figura 1.13** muestra un esquema de una dendrita equiaxial donde se observan parámetros morfológicos usados para estimar el crecimiento. R^e es el radio estimado, V_{env}^e es la velocidad estimada promedio, α_d^e y α_s^e es la composición cercana a la dendrita y en la dendrita de la fase α respectivamente, v_{tip}^c es la velocidad de crecimiento de la punta dendrítica o brazo primario, λ_2 es el espaciamiento de los brazos secundarios, también se muestra puntada la esfera equivalente que ocuparía si fuese una esfera sólida y la envoltura de la dendrita a la que equivale.

La primera estimación para predecir el crecimiento dendrítico es enfocarse en la forma de la dendrita. Las simplificaciones son dos principalmente: Enfoque en la punta dendrítica y analizar el transporte de calor.

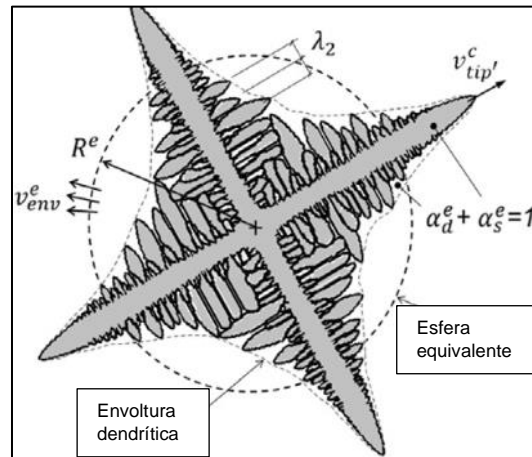


Figura 1.13 Esquema de que muestra la esfera y la dendrita equivalente [29].

- Enfoque en la punta de la dendrita que forma una esfera truncada o semiesfera (**Ver Figura 1.14**).

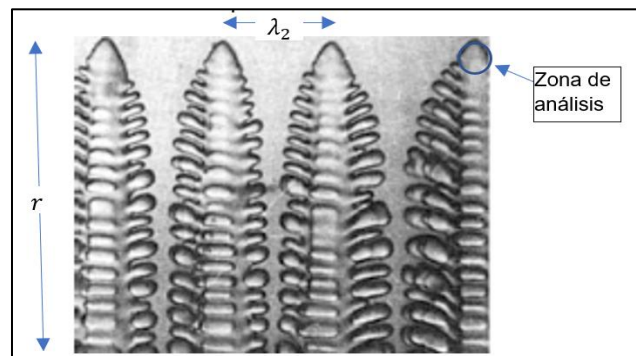


Figura 1.14 Punta de la dendrita con la estimación de la esfera truncada. Zona de análisis estimando esfera truncada, r es el tamaño de la dendrita y λ_2 es la distancia entre las puntas dendríticas [96].

Para resolver el gradiente de composición en la punta de la dendrita, en el caso de la suposición de esfera truncada, es necesario resolver la ecuación de difusión en coordenadas esféricas sin difusión tangencial: $\frac{d}{dr} \left(r^2 \frac{dc}{dr} \right) = 0$.

La solución general de esta ecuación es $C = C_1 + \frac{C_2}{r}$ donde C_1 y C_2 son constantes. Las condiciones de frontera usadas son:

$$r \rightarrow \infty \quad C = C_0 \quad \text{siendo} \quad C_1 = C_0$$

$$r = r_0 \quad C = C_L \quad \text{siendo} \quad C_2 = r_0(C_L - C_0)$$

En la **Figura 1.15** se muestran las estimaciones geométricas y de concentración para realizar el balance de transporte de materia, las cuales se toman para evaluar las condiciones de frontera utilizadas:

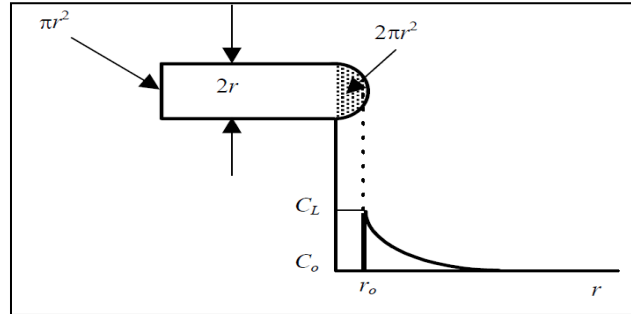


Figura 1.15 Estimaciones geométricas y de concentración, del modelo de punta en forma de esfera truncada.

Con las condiciones de frontera y la ecuación planteada para el perfil de concentración es dada por:

$$\pi r^2 V (C_L - C_s) = -2\pi r^2 D \left(\frac{dC}{dr} \right)_{punta} \quad \text{ó} \quad V C_L (1 - k) = -2D \left(\frac{dC}{dr} \right)_{r=r_0}$$

Donde $C = C_0 + \frac{r_0(C_L - C_0)}{r}$ y $\left(\frac{dC}{dr} \right)_{r=r_0} = r_0(C_L - C_0) \frac{d}{dr} r^{-1} = r_0(C_L - C_0) r_0^{-2} = \frac{(C_L - C_0)}{r_0}$

$$V C_L (1 - k) = -2D \left(\frac{(C_L - C_0)}{r_0} \right)$$

$$\frac{V r_0}{2D} = \frac{C_L - C_0}{C_L (1 - k)} \quad (1.13)$$

Adicionalmente las definiciones del número de Péclet solutal (P_c) y el factor de saturación (Ω_c) son:

$$P_c = \frac{V r}{2D} \quad \text{y} \quad \Omega_c = \frac{C_L - C_0}{C_L (1 - k)}$$

Conjuntando la solución del transporte de la suposición de la esfera truncada, con la definición del Péclet solutal y saturación térmica se obtiene:

$$P_c = \Omega_c \quad (1.14)$$

Donde la velocidad de crecimiento de la dendrita está definida como:

$$V = \frac{\Omega_c 2D}{r_0} \quad (1.15)$$

- Para el análisis de transporte de calor usualmente se utilizan ecuaciones similares que cuando domina el transporte de materia:

$$\pi r^2 V \frac{\Delta H_f}{C_p} = -2\pi r^2 \alpha_L \left(\frac{dT}{dr} \right)_{r=r_0} \quad (1.16)$$

La solución general de esta ecuación es $T = C_1 + \frac{C_2}{r}$ donde C_1 y C_2 son constantes. Las condiciones de frontera usadas son:

$$r \rightarrow \infty \quad T = T_{seno} \quad \text{siendo } C_1 = T_{seno}$$

$$r = r_0 \quad T = T_f \quad \text{siendo } C_2 = r_0(T_f - T_{seno})$$

Donde $T = T_{seno} + \frac{r_0(T_f - T_{seno})}{r}$; y $\left(\frac{dT}{dr} \right)_{r=r_0} = r_0(T_f - T_{seno}) \frac{d}{dr} r^{-1} = r_0(T_f - T_{seno}) r_0^{-2} = \frac{(T_f - T_{seno})}{r_0}$; aplicando a la **Ecuación 1.16** se obtiene:

$$P_T = \frac{V r_0}{2\alpha_L} = \frac{\Delta T_T}{\Delta H_f} C_p = \Omega_T \quad \text{o} \quad \pi r^2 V \frac{\Delta H_f}{C_p} = -2\pi r^2 \alpha_L \frac{(T_f - T_{seno})}{r_0} \quad (1.17)$$

La punta dendrítica puede ser estimada por un paraboloide de revolución, la solución a este arreglo la propuso Ivanstov [97] como un acercamiento con un crecimiento geométrico en el número de Péclet, que denominó número de Ivanstov ($I_v(P_c)$).

$$I_v(P_c) = \Omega_c \quad (1.18)$$

$$\text{Donde } I_v(P_c) = P_c \exp(P_c) E_1 P_c$$

Para aproximarse a este número de Ivanstov, Kurz, Giovanola y Trivedi [40] estimaron que se puede determinar mediante el arreglo:

$$I_v(P_c) = P_c \exp(P_c) [a_0 + a_1 P_c + a_2 P_c^2 + a_3 P_c^3 + a_4 P_c^4 + a_5 P_c^5 - \ln(P_c)]$$

Donde $a_0 = -0.57721566$, $a_1 = 0.9999193$, $a_2 = -0.24991055$, $a_3 = 0.05519968$, $a_4 = -0.0096004$, $a_5 = 0.00107857$.

El criterio extremo establece que la velocidad máxima de la dendrita es limitada por su estabilidad. Implicando que la perturbación creciente tiene una velocidad máxima y un mínimo de subenfriamiento. Estas condiciones se ven graficadas en la **Figura 1.16**. muestra el radio de la punta dendrítica respecto a la velocidad de crecimiento, estableciendo un límite capilar y de estabilidad constitucional condicionado con el límite de difusión.

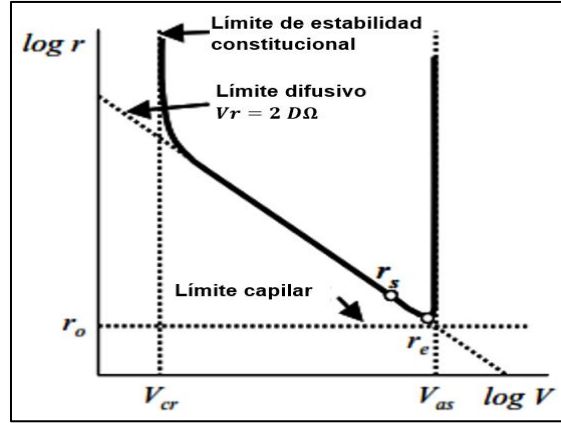


Figura 1.16 Velocidad de crecimiento correlacionada con el radio de la punta dendrítica.

La expresión de sub enfriamiento respecto al efecto solutal y curvatura es: $\Delta T = \Delta T_c + \Delta T_r$: $\Delta T_c = -m(C_L - C_0)$; usando la **Ecuación 1.14** $-m(C_L - C_s)\Omega_c = -m(1 - k)C_L\Omega_c = m(k - 1)C_L P_c = m(k - 1)C_L \frac{Vr}{2D}$, y de la ecuación $\Delta T_r = \frac{2\Gamma}{r}$; la ecuación que define este sistema es:

$$\Delta T = -m(1 - k)C_L \frac{Vr}{2D} + \frac{2\Gamma}{r} \quad (1.19)$$

Derivando la **ecuación 1.19** para obtener la máxima curvatura:

$$\frac{\delta \Delta T}{\delta r} = \frac{1}{\delta r} \left(-m(1 - k)C_L \frac{Vr}{2D} + \frac{2\Gamma}{r} \right) = 0; \text{ obteniendo que: } 0 = \frac{m(k-1)C_L V}{2D} + \frac{2\Gamma}{r^2},$$

despejando r: $r = \left(\frac{4D\Gamma}{m(k-1)C_L} \right)^{0.5}$ y sustituyendo con la **ecuación 1.19** se obtiene la ecuación:

$$V = \left(\frac{D_L}{4\Gamma(k-1)C_L} \right) \Delta T^2; \text{ siendo } \mu = \frac{D_L}{4\Gamma(k-1)C_L} \quad (1.20)$$

El criterio de estabilidad marginal propuesto inicialmente por Langer *et al* [98] conocido como LGK, implementa análisis de estabilidad lineal usando un paraboloides con la estimación de Ivanstov. Un pequeño cambio en la punta dendrítica es causado por la energía interfacial. Infiriendo que la punta no es estable a valores pequeños para el criterio extremo. Siendo propuesto tamaños altos de radio durante el crecimiento (estabilidad marginal). Se estima el uso de los subenfriamientos: solutal, térmico y curvatura, usando la **Ecuación 1.19** y al subenfriamiento térmico (Ver **Anexo I**):

$\Delta T = \Delta T_r + \Delta T_T + \Delta T_c = \frac{2\Gamma}{r} + (T_f - T_{seno}) - m(C_L^* - C_0)$; considerando las **Ecuaciones 1.17 y 1.18**: la ecuación que rige el subenfriamiento es:

$$\Delta T = \frac{\Delta H_f}{c_p} I_v(P_T) + mC_0 \left[1 - \frac{1}{1 - (1-k)I_v(P_c)} \right] + \frac{2\Gamma}{r} \quad (1.21)$$

Al derivar encontrando el mínimo el radio se evalúa con la ecuación:

$$r = \frac{\Gamma}{\sigma^*} \left[\frac{\Delta H_f}{c_p} P_T - P_c \frac{mC_0(1-k)}{1 - (1-k)I_v(P_c)} \right]^{-1} \quad (1.22)$$

Usando la Ecuación 1.22 y la relación térmica de Péclet ($P_c = P_T \left(\frac{\alpha}{D}\right)$); usando $\sigma^* \approx \frac{1}{4\pi^2}$ como parámetro en la punta dendrítica, realizando simplificaciones del número Ivanstov, lo obtuvieron Nastac et al [86] con el modelo (LGK), asumiendo al mínimo el subenfriamiento térmico, el crecimiento de la punta dendrítica es definida por la ecuación:

$$V = \left[2\pi^2 \Gamma \left(\frac{m(k-1)C_L^*}{D_L} + \frac{\Delta H_f}{c_p \alpha_L} \right) \right]^{-1} \Delta T^2 \quad \text{ó} \quad V = \mu \Delta T^2 \quad \text{siendo} \quad \mu = \left[2\pi^2 \Gamma \left(\frac{m(k-1)C_L^*}{D_L} + \frac{\Delta H_f}{c_p \alpha_L} \right) \right]^{-1} \quad (1.23)$$

El modelo LGK presenta datos termo físicos medibles partiendo de información experimental, lo que permite que puedan usarse para estimar los coeficientes exponenciales y pre-exponenciales.

1.7 Modelo LGK Multicomponente

La mayor parte de los modelos de solidificación han sido aplicados a sistemas con uno o dos componentes, sin embargo, las aleaciones de interés industrial son de naturaleza multicomponente por lo que resulta necesario extender los modelos.

Para predecir el proceso de solidificación de una aleación multicomponente se necesita conocer el diagrama de fase particular de cada aleación, en general son estimados partiendo de diagramas de fase de equilibrio termodinámico, omitiendo algunos elementos constitutivos de la aleación.

Algunos diagramas conocidos son desarrollados, como ejemplo el trabajo de Löffler *et al* [99], mediante cálculos basados en el procedimiento termodinámico de energía libre de Gibbs asociada a la fase líquida y a las fases sólidas en formación, y se conocen previamente los microconstituyentes que se pueden formar durante la solidificación, así como el reparto de soluto al equilibrio que existe durante la formación de dichos microconstituyentes, así como los valores asociados del calor latente de solidificación.

Una metodología a seguir para considerar un sistema multicomponente ha sido descrita por Koseki [100] y Cheng [101] que se ha aplicado a diversos materiales [102], una primera aproximación al problema es propuesta por la metodología que ha sido denominada diagrama de solidificación, en donde los coeficientes de partición y las pendientes de líquidus son tomadas de los sistemas binarios involucrados u obtenidas experimentalmente y asumiendo que no existen interacciones entre los efectos impartidos por diferentes elementos aleantes.

Partiendo de lo anterior la temperatura del líquidus para un sistema multicomponente mediante esta aproximación, puede ser expresada de la siguiente manera, en función de la composición del líquido remanente:

$$T_L = T_m + \sum_{i=1}^n m_{i,j} C_{i,j} \quad (1.24)$$

Para describir el avance de la punta dendrítica durante la solidificación primaria de una relación multicomponente, Zou *et al* [103] propusieron una extensión del modelo LGK al caso multicomponente, modificando a la **Ecuación 1.21** para incluir la contribución del sobre enfriamiento total, asociado a la difusión de cada elemento aleante conforme los solutos son rechazados por la punta dendrítica en crecimiento:

$$\Delta T = \sum \Delta T_{c,i} + \Delta T_r + \Delta T_t \quad (1.25)$$

Las **Ecuaciones 1.19** y **1.21**, no establecen un reparto del soluto del sistema, unificándolas con el efecto de los cambios de concentración en el líquido remanente asociados al reparto de soluto entre las fases sólidas y líquidas. Con la **Ecuación 1.21** y **1.24** se llega a la ecuación:

$$\Delta T = \frac{\Delta H_f}{c_p} I_v(P_t) + \sum \left[m_{i,j} C_{0,i} \left\{ 1 - \frac{1}{1 - (1 - k_{0,i}) I_v(P_c)} \right\} \right] + \frac{2\Gamma}{R} \quad (1.26)$$

Donde el radio de la punta de la dendrita, caso multi componente, es calculado empleando:

$$r = \frac{(\Gamma/\sigma^*)}{\frac{P_t \Delta H_f}{c_p} - \sum \left[\frac{P_c m_{i,j} C_{0,i} (1 - k_{0,i})}{1 - (1 - k_{0,i}) I_v(P_c)} \right]} \quad (1.27)$$

Resolviendo, mediante métodos numéricos las **Ecuaciones 1.26** y **1.27**, se obtiene la velocidad de avance de la punta teórica que corresponde a su enfriamiento total dado; realizando el cálculo para diferentes subenfriamientos, al tratar esta información mediante regresión polinomial se obtiene una expresión que permite calcular a la velocidad de avance de la punta dendrítica como una función del subenfriamiento. Este proceso es aplicable a principios de los casos en donde la cantidad de soluto es tal que todos los solutos no modifican la ruta de solidificación existente por lo tanto es aplicable a los sistemas bajo estudio.

La aplicabilidad de los modelos eutécticos y dendríticos dependen de una capacidad predictiva real que corresponda con los datos térmicos, termo físicos y cinéticos, con los que se cuenten y utilicen para hacer predicción durante las simulaciones, en este marco existe una gran limitación de la información disponible con respecto a parámetros de crecimiento de granos equiaxial dendrítico y eutéctico durante la solidificación, es por esta razón que los software comerciales dan la oportunidad de adicionar los valores de aleaciones no estudiadas.

En este trabajo se desarrollan metodologías para obtener modelos de crecimiento, además de procedimientos experimentales que permitan validar este tipo de modelos y extraer información adicional empleando métodos disponibles en la literatura como son los métodos de análisis térmicos de Newton y Fourier. Adicionalmente es posible obtener un modelo de crecimiento de grano y validarlo, involucrando el poder simular la solidificación que se da bajo las condiciones experimentales, de tal manera que a esa información generada se pueda cotejar con la información experimental para así verificarla e identificar diferencias con la realidad experimental. El método experimental aplicado consiste en obtener una muestra líquida y enfriarla en condiciones controladas, buscando obtener todo un paquete de información básica para poder simular aleaciones de estructuras equiaxiales, dicha información corresponde a: modelos de crecimiento, capacidad calorífica, calores latentes además de coeficientes de transferencia de calor.

HIPÓTESIS

Asumiendo un modelo simplificado de crecimiento de grano y a partir de conocer la densidad de granos, así como la evolución térmica y de fracción solidificada de una aleación eutéctica o hipoeutéctica, durante su enfriamiento y solidificación, es posible caracterizar la cinética de crecimiento, mediante la determinación de los parámetros de crecimiento de grano.

OBJETIVOS

Desarrollar un nuevo método para caracterizar la cinética de crecimiento de grano, a partir de la determinación de los parámetros cinéticos de crecimiento con base en mediciones experimentales de curvas de enfriamiento y determinaciones metalográficas.

Determinar el efecto de la velocidad de enfriamiento sobre la cinética de crecimiento de grano de aleaciones eutécticas Al-Cu, Al-Si y Al-Ni.

Determinar el efecto del contenido de soluto sobre la cinética de crecimiento de grano de aleaciones hipoeutécticas Al-Cu.

Validar la pertinencia de los valores obtenidos por el método propuesto para los parámetros de crecimiento de grano, comparando su desempeño con otros métodos y modelos reportados en la literatura en cuanto a la capacidad de simular las curvas de enfriamiento experimental en los momentos iniciales de la solidificación.

CAPÍTULO 2 PROPUESTA DE MÉTODOS PARA DETERMINAR LA CINÉTICA DE CRECIMIENTO DE GRANO DURANTE LA SOLIDIFICACIÓN Y SU VALIDACIÓN.

En este capítulo se presentan las metodologías propuestas para la determinación de la cinética de crecimiento de granos equiaxiales eutécticos y dendríticos, lo cual incluye el planteamiento de los aspectos más relevantes de los métodos de evaluación de parámetros de crecimiento propuesto, así como los métodos de Newton y de Fourier necesarios para obtener la evolución de la fracción sólida y las determinaciones metalográficas de densidad de grano.

Con el propósito de contar con una herramienta para validar el método propuesto, se mencionan los aspectos más importantes asociados con el planteamiento e implementación de un micro macro modelo de solidificación equiaxial eutéctica y dendrítica.

Este micro macro modelo es empleado para la generación de curvas de enfriamiento simuladas que son posteriormente procesadas numéricamente aplicando el análisis térmico de Fourier y el de Newton, con la información de evolución de fracción sólida generada, así como las curvas de enfriamiento simuladas y la densidad de núcleos considerados por el micro macro modelo, serán empleadas para validar el método y comparar sus predicciones con los métodos de Degand [73], Dioszegi [74] y FG [104]. Los procedimientos experimentales serán expuestos en el **Capítulo 3** y los resultados de la validación serán discutidos en el **Capítulo 4**.

2.1 Propuesta del Método de crecimiento libre para determinar la cinética de crecimiento de granos eutécticos durante la solidificación.

El método que fue implementado en este trabajo para obtener los parámetros cinéticos del crecimiento de grano equiaxial lo denominamos método de crecimiento libre o “Free Growth” (FG) [104, 105, 106]. El modelo de crecimiento que adopta este método corresponde a la siguiente relación buscando la determinación experimental de los coeficientes cinéticos de crecimiento de grano asociados n y μ .

$$V_s = \frac{dR}{dt} = \mu \Delta T^n \quad (2.1)$$

Este método involucra la necesidad de generar experimentalmente información relativa a la evolución de la fracción sólida y densidad de granos presentes durante la solidificación. El método propuesto asume lo siguiente:

- 1- Todos los granos que han nucleado inicialmente permanecen durante toda la solidificación y presentan a cada momento el mismo radio promedio durante su crecimiento.
- 2- El crecimiento de los granos termina cuando se presenta la máxima recalescencia
- 3- Los granos permanecen en la misma posición, no existen flujos convectivos en el líquido remanente.
- 4- La morfología de los granos en crecimiento es esférica.
- 5- Existe una densidad de granos N conocida y determinada experimentalmente mediante métodos metalográficos.

Para aplicar el método FG, en el caso de aleaciones eutécticas, que fue la primera aplicación publicada de este método, se utiliza la sección de la curva de enfriamiento asociada al inicio de la solidificación entre el tiempo de máximo subenfriamiento (t_{min}) y el tiempo de la máxima rehelección (t_{max}) (Ver **Figura 2.1**), antes que ocurra el empalmamiento de los granos y asumiendo que durante la solidificación los granos son esféricos con un radio instantáneo (R^t) (Ver **Figura 2.2**), los granos crecen libremente al mismo tiempo de modo que la fracción sólida en las primeras etapas de crecimiento en un tiempo (t) está dada por la siguiente relación:

$$f_s^t = \frac{4}{3}\pi N_v (R^t)^3 \quad (2.2)$$

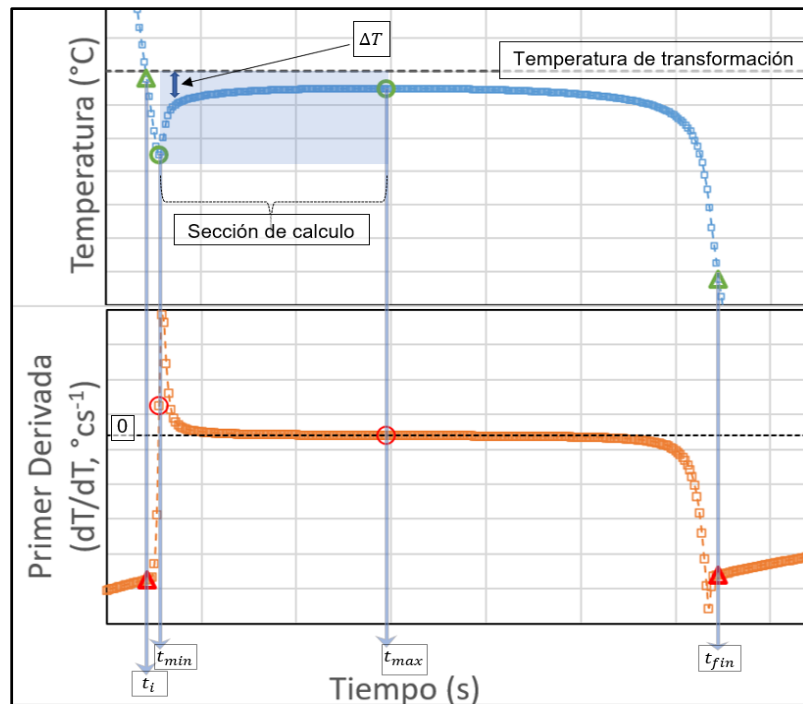


Figura 2.1 Representación de una curva típica de una transformación de fase y su derivada respecto al tiempo, se representa el tiempo de máximo subenfriamiento, el tiempo de máxima rehelección, tanto inicio y fin de la solidificación.

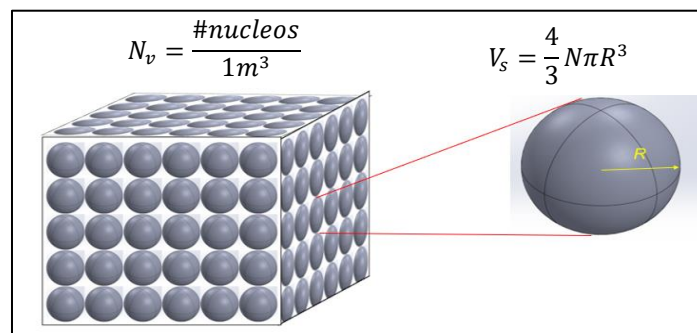


Figura 2.2 Representación de la densidad de núcleos en un espacio cubico y el volumen del grano equiaxial esférico.

La densidad de granos por unidad de volumen en la muestra, N_v , puede conocerse mediante metalografía óptica cuantitativa, y f_s^t es obtenida usando el análisis térmico de Newton o Fourier. Adicionalmente es posible calcular la velocidad de crecimiento del radio de grano $\left(\frac{dR}{dt}\right)$ mediante diferencias finitas:

$$\left(\frac{dR}{dt}\right) = \frac{R^t - R^{t-dt}}{\Delta t} \quad (2.3)$$

De esta manera es posible determinar mediante la **Ecuación 2.2**, a partir de dato de fracción sólida determinado por los métodos de Newton o Fourier y de la densidad de granos N_v determinada metalográficamente, el radio instantáneo de grano R^t para cada punto de la curva de enfriamiento.

El subenfriamiento es calculado experimentalmente tomando la diferencia entre la temperatura eutéctica y la temperatura instantánea medida por el termopar T^t de acuerdo con:

$$\Delta T = T_e - T^t \quad (2.4)$$

Donde T_e es la temperatura de transformación de fase al equilibrio, T^t es la temperatura instantánea obtenida por un termopar durante el enfriamiento y solidificación de la muestra.

Los coeficientes de crecimiento eutéctico de la **Ecuación 2.1** pueden ser determinados por medio de una regresión lineal en un gráfico $\log(dR/dt)$ contra $\log(\Delta T)$ (**Figura 2.3**), donde el parámetro n es la pendiente de la recta y μ es la ordenada al origen. De esta forma la sección de cálculo con los supuestos planteados pertenece al intervalo dado entre un mínimo y máximo, esto identificable con la primera derivada de la temperatura respecto al tiempo (Ver **Figura 2.3**)

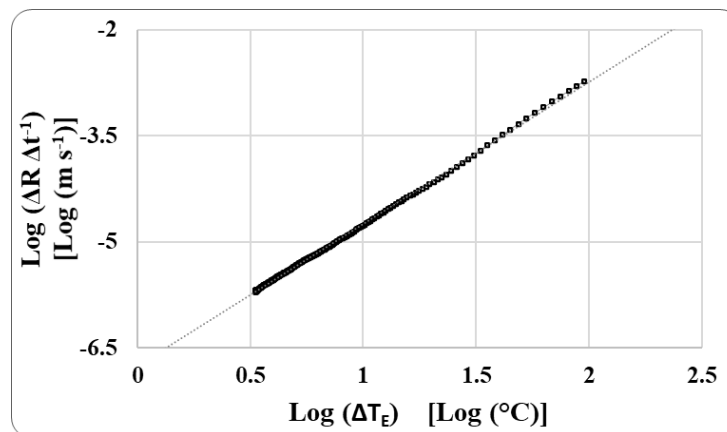


Figura 2.3 Ejemplo del gráfico del $\log(dR/dt)$ en función del $\log(\Delta T)$.

2.2 Ampliación de la aplicación del método de crecimiento libre a la obtención de parámetros de crecimiento de granos equiaxiales dendríticos.

La principal diferencia entre el crecimiento de los granos equiaxiales eutécticos con los dendríticos es que los granos eutécticos están totalmente sólidos y cesan su crecimiento cuando se da el empalmamiento, el cual se asume que sucede al alcanzar la recalescencia máxima. Los granos dendríticos son semisólidos y crecen radialmente hasta empalmarse unos con otros en lo que se ha denominado punto de coherencia dendrítica y seguir su solidificación mediante un proceso de engrosamiento de la fase dendrítica.

Tomando en cuenta las suposiciones adoptadas por el método de crecimiento libre, aplicadas al crecimiento de granos eutécticos totalmente sólidos, que implican que dicho crecimiento cesa cuando se alcanza la máxima recalescencia, en el caso de los granos dendríticos, su crecimiento cesa cuando se alcanza la coherencia dendrítica y en consecuencia la generación, con base en información de la densidad de granos y del subenfriamiento requeridas para la obtención de los parámetros de crecimiento se concentra en el periodo de tiempo comprendido entre el inicio de solidificación y el punto de coherencia dendrítica.

En consecuencia, el procesamiento de la curva de enfriamiento para caracterizar el crecimiento de los granos dendríticos procesa los datos de la curva de enfriamiento generados como límite hasta el punto de coherencia dendrítica y por lo tanto la determinación del punto de coherencia dendrítica constituye un componente esencial en la implementación de la determinación de los parámetros de crecimiento de grano dendrítico.

El crecimiento equiaxial dendrítico presenta el punto de coherencia dendrítica (PCD), que corresponde al momento en el que durante la solidificación se presenta el contacto entre los granos equiaxiales dendríticos en crecimiento y se forma en toda la pieza un esqueleto sólido.

Entender y medir el PCD es importante para comprender y controlar la solidificación de una aleación hipoeutéctica en proceso de solidificación, ya que marca la transición de la alimentación masiva a la alimentación interdendríticas para la compensación de la contracción líquida y de solidificación de una pieza industrial.

Durante las primeras etapas de la solidificación, las dendritas equiaxiales están separadas unas de otras y se mueven libremente en la masa fundida. Sin embargo, a medida que la temperatura baja, las puntas dendríticas de los granos en crecimiento comienzan a chocar entre sí hasta que se forma una red sólida dendrítica. Existen varios defectos de fundición como la macro segregación, la contracción, los micro-rechupes y el fisuramiento en caliente que comienzan a desarrollarse después del PCD. Por lo tanto, una comprensión clara de las características de solidificación presentes en el PCD y de los factores que lo influyen son cruciales para el control de calidad del proceso y para el desarrollo de nuevas aleaciones y de nuevos procesamientos enfocados al desarrollo de productos de fundición de alto rendimiento [107].

Para encontrar experimentalmente el PCD se han desarrollado cinco métodos, el primero de naturaleza mecánica y basada en la medición del torque de un sensor rotatorio inmerso en la aleación líquida durante su solidificación y los cuatro restantes basados en el procesamiento de curvas de enfriamiento obtenidas mediante la inmersión de hasta tres

termopares en la aleación liquidan durante su enfriamiento y solidificación. En la **tabla 2.1** se puntualizan dichos métodos.

En este trabajo y en vista de que la determinación de los parámetros de crecimiento de grano se basa en el procesamiento numérico de la curva de enfriamiento obtenida de un solo termopar inmerso en la muestra, de manera natural se optó por determinar el PDC mediante el método de un solo termopar desarrollado por Djurdjevic [107] y que se detalla a continuación.

Tabla 2.1 Métodos y características para determinar el punto de coherencia dendrítica.

Método	Características	Material	Referencia
Técnica reológica	Se basa en el hecho de medir la resistencia a cizallamiento de la muestra mientras gira, se monitorea el torque requerido para girar una paleta o disco en la muestra mientras se realiza el proceso de solidificación.	Al-(5,7,9) Si-(0-4) Cu	Huber <i>et al</i> 2019 [108].
Análisis térmico de la diferencia mínima de temperatura entre dos curvas de enfriamiento	Utiliza la diferencia de temperatura registrada por dos termopares, uno ubicado en el centro de la muestra y un segundo en la orilla. Considerando que cuando se presenta la diferencia mínima las dendritas se han tocado.	Al-Si (A356)	Peeratats uwan <i>et al</i> 2021 [109].
Análisis térmico de la segunda derivada de una curva de enfriamiento	Utiliza la historia térmica de dos termopares y busca el punto mínimo en la segunda derivada respecto al tiempo y posición.	Al-(8-12) Si	Gómez <i>et al</i> 2018 [110].
Técnica de difusividad térmica.	Usa tres termopares ubicados en el centro en el medio y en la orilla de una muestra cilíndrica.	ADC12 Aluminio	Malekan <i>et al</i> 2016 [111]
Método de un solo termopar	Usa un termopar ubicado en el centro una muestra cilíndrica y se basa en la identificación del PCD en la gráfica de velocidad de enfriamiento contra temperatura.	ADC12 Aluminio	Malekan <i>et al</i> 2016 [111]

Djurdjevic [107] desarrolló un nuevo método para determinar el PDC con base en el procesamiento de una curva de enfriamiento para generar la gráfica de velocidad de enfriamiento contra temperatura y de ahí identificar la coherencia dendrítica al interpretar la evolución observada en esta gráfica, comparándola con el método desarrollado por Bäckerud *et al.* [112] que emplea dos termopares y que fue validado mediante mediciones reológicas.

La **Figura 2.4** muestra en primer plano la curva de enfriamiento de una aleación Al-Fe-Si-Cu-Mg y en segundo plano, trazada con una línea gris, la primera derivada de la temperatura con respecto al tiempo (dT/dt). También muestra en segundo plano a la curva cero de referencia o línea base y en un tercer plano a la segunda derivada de la curva de enfriamiento con respecto al tiempo. En el punto 1 inicia la solidificación, que con el inicio de la liberación del calor latente provoca que la derivada se dispare hacia valores positivos. A partir de este punto y hasta el punto 4, que corresponde al fin de la solidificación, se traza la curva cero o línea base de referencia con el fin de evaluar entre otros aspectos, a partir de la integración del área entre la primera derivada y la curva cero, el calor latente de fusión y la evolución de la fracción sólida. La grafica de la primera derivada, dT/dt también permite identificar otras temperaturas características como la nucleación del eutéctico principal de Al-Si, punto 2, y la nucleación eutéctica Al-Fe-Si- Cu-Mg, punto 3, que se presentan durante la solidificación de la aleación Al-Si-Cu-Mg, que utilizó como ejemplo Djurdjevic *et al.* [107].

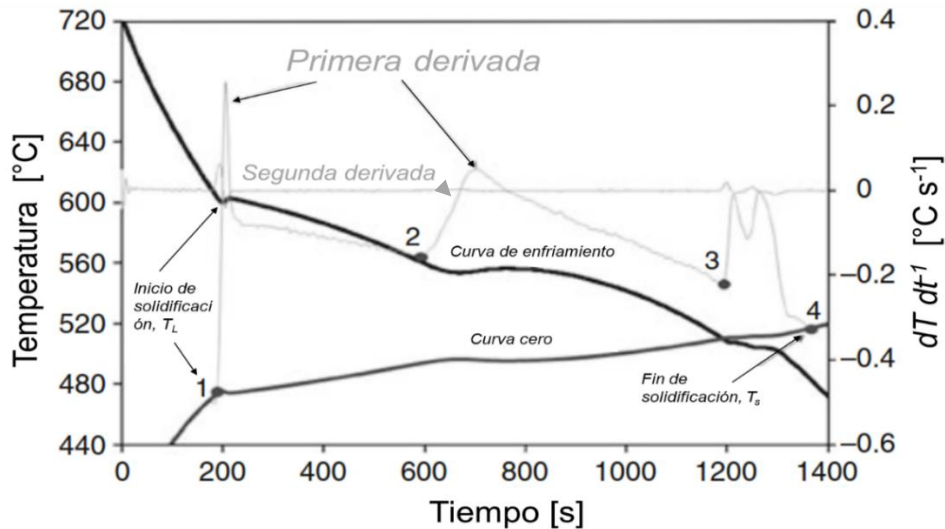


Figura 2.4 Curva de enfriamiento (AlSi9Cu4) obtenida del termopar central (TC) trazado como función de tiempo. La primera, segunda derivada y la línea base se calcularon según Kierkus y Sokolowski. Las flechas señalan los principales eventos de solidificación [113].

La **Figura 2.5** presenta de manera superpuesta la evolución de la velocidad de enfriamiento, dT/dt con respecto a la temperatura y al tiempo. Como se puede observar, ambas graficas presentan cambios notables a lo largo de la solidificación asociados con la formación de los diferentes microconstituyentes. En particular, la gráfica de dT/dt versus temperatura muestra bucles en el área de la nucleación y crecimiento primario α -Al, zona 1 y en la nucleación y crecimiento eutéctico Al-Si, zona 2, mientras que en la zona 3 se presenta la nucleación del eutéctico Al-Fe-Si-Cu-Mg.

Bäckerud *et al.* [112] desarrollaron la técnica de dos termopares para determinar el PCD. Un termopar está ubicado en el centro (T_c) de un crisol de prueba y el otro cercano a la pared interior del crisol (T_w). El PCD se determina identificando el mínimo local en la curva del gradiente térmico ΔT versus el tiempo ($\Delta T = T_w - T_c$) ilustrado por punto A en la **Figura 2.6**. El razonamiento de que el PCD se produce en el mínimo de esta curva de ΔT en función del tiempo se basa en el hecho de que la eliminación de calor del sólido es más rápida que la de la fase líquida y al alcanzarse las puntas dendríticas en la coherencia formando un esqueleto sólido, a partir de ese momento la extracción de calor del sistema es más efectiva lo que provoca una continua disminución de la diferencia entre la temperatura del centro y de la orilla de la muestra. Djurdjevic [107] utilizó este método para relacionar el bucle inicial formado durante la solidificación de la **Figura 2.5**, con la coherencia dendrítica.

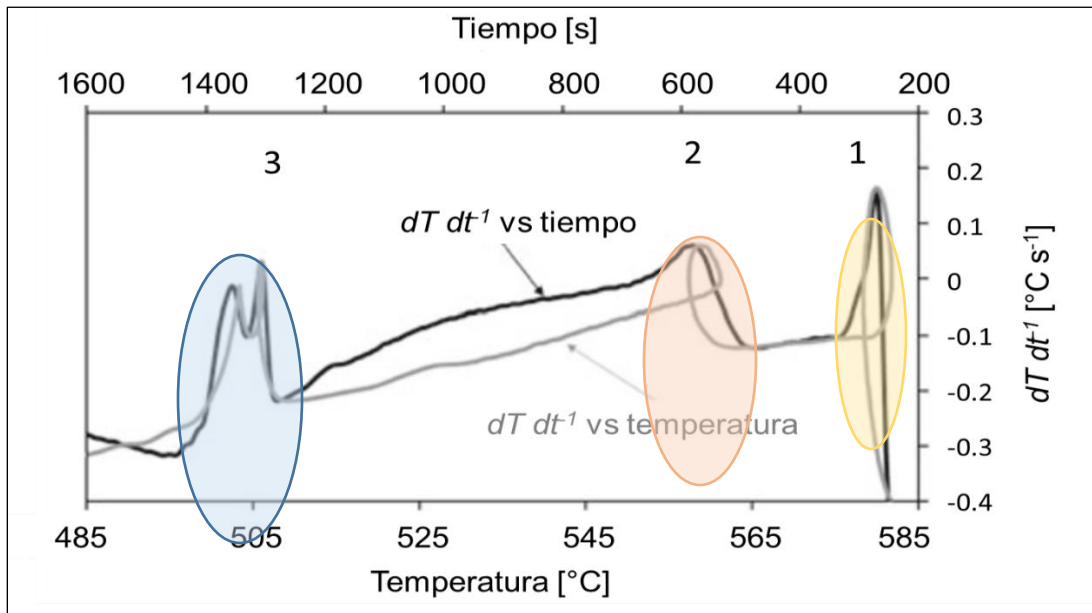


Figura 2.5 Curvas de tiempo y temperatura superpuestas dT/dt representan los datos del termopar TC que corresponde a la curva de enfriamiento de la Figura. 2.4 [107].

La **Figura 2.6** presenta las gráficas superpuestas del gradiente térmico (ΔT), trazado con una línea gris clara y de la velocidad de enfriamiento dT/dt , trazada con una línea gris oscura, ambas en función de la temperatura. Djurdjevic [107] comparó muchas curvas dT/dt versus temperatura y ΔT versus temperatura encontrando que el punto del codo (punto B) en la curva dT/dt versus temperatura y el punto mínimo (punto A) de la curva ΔT versus la curva de temperatura, correspondiente al PCD, ocurren consistentemente en la misma temperatura. El punto donde la curva dT/dt se desvía repentinamente de la tangente horizontal se ha elegido como el PCD (punto B). A partir de esos resultados Djurdjevic demostró que el método de un termopar que utiliza la curva dT/dt versus temperatura puede reemplazar el método de dos termopares de ΔT versus tiempo logrando con ello una simplificación y una reducción de los costos de determinación del PCD.

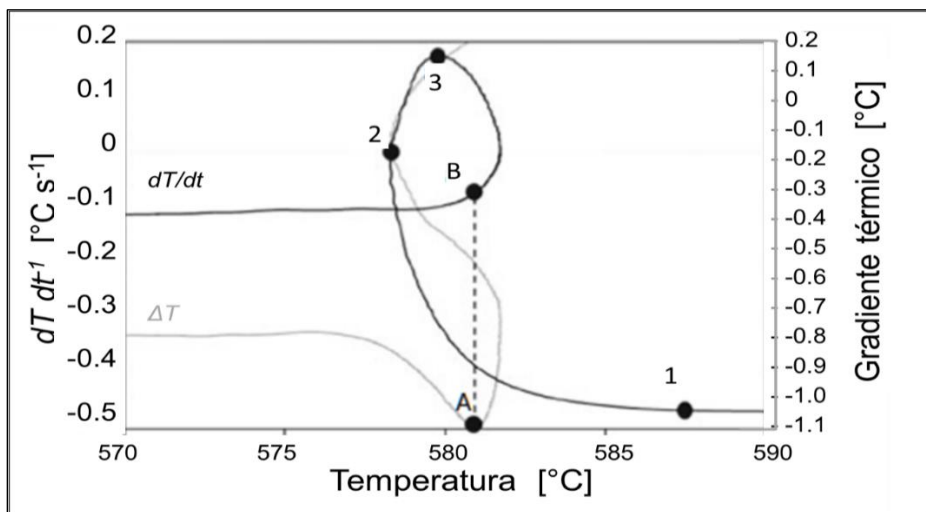


Figura 2.6 “Acercamiento al punto de coherencia dendrítica para determinar las características usando el gradiente térmico y la primera derivada de la temperatura respecto al tiempo, que proviene de la curva de la Figura 2.5.

En este trabajo se aplicó el método de Djurdjevic [107] para determinar el PCD. En la **Figura 2.7** se muestra un ejemplo de la aplicación de este método en el caso del procesamiento de la curva de enfriamiento asociado a la aleación experimental Al-3%Cu, incluyendo de manera superpuesta la evolución en función de la temperatura de la velocidad de enfriamiento y de las fracciones sólidas determinadas mediante los métodos de Newton y de Fourier. Analizando lo que se observa en la **Figura 2.7** se puede constatar que es totalmente posible determinar mediante este procedimiento la fracción sólida correspondiente al PCD empleando los métodos de Newton y de Fourier.

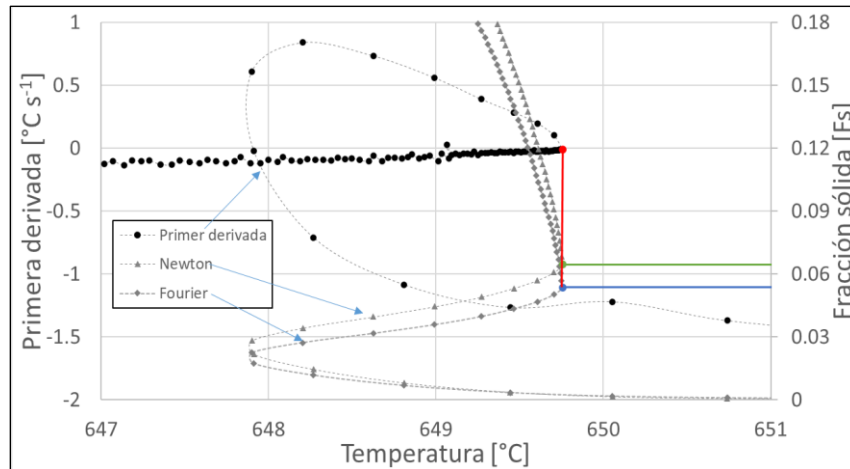


Figura 2.7 Ejemplo de aplicación sobre una muestra de Al-Cu 3%. Elaboración propia.

Este proceso es reproducible en todas las aleaciones estudiadas en este trabajo, además de ser validado por diversos autores [114, 115].

Una vez planteado el proceso de obtención del punto PCD, se identifica la sección de datos que se utilizan, la **Figura 2.8** muestra los puntos identificados en una curva de enfriamiento de una aleación hipoeutéctica típica.

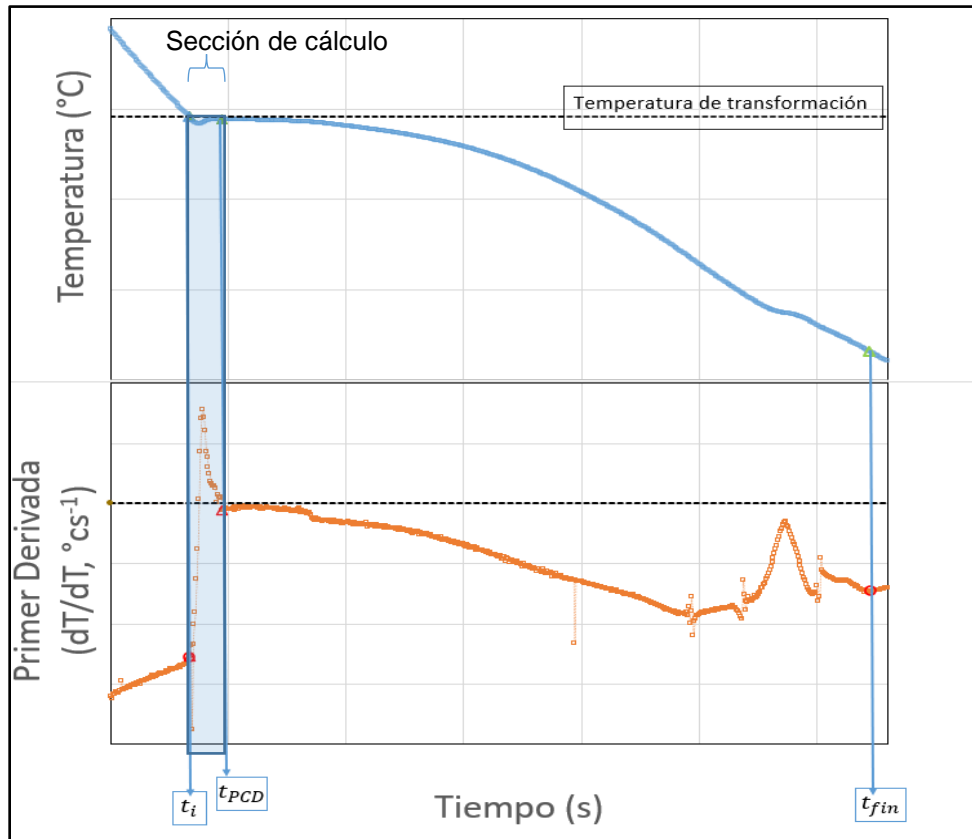


Figura 2.8 Representación de una curva típica de una transformación de fase y su derivada respecto al tiempo, se representa el tiempo de inicio de solidificación, el tiempo que se presenta el PCD, tanto inicio y fin de la solidificación.

2.3 Implementación del análisis térmico de Fourier y Newton

Como se ha mencionado, existen dos métodos de análisis térmico que parten de la información de temperatura respecto al tiempo para obtener el desarrollo de la fracción de fase transformada, misma que puede provenir de aleaciones de interés industrial para la producción de piezas fundidas, estas son el método de Newton y de Fourier.

Para el método de Newton, se parte de la suposición que los gradientes térmicos dentro de la muestra son despreciables, es decir el número de Biot es menor a 0.1, al tener esta suposición la ecuación que define la conservación de la energía es:

$$-h_{\infty}A(T - T_{\infty}) + \frac{dQ}{dt} = mC_p \frac{dT}{dt} \quad (2.5)$$

Donde h es el coeficiente de calor convectivo global, A es el área de transferencia de calor, T_{∞} es la temperatura ambiente, Q_s es el calor instantáneo generado durante la solidificación, m la masa de la muestra y C_p el coeficiente capacidad calorífica. Re-arreglando la **Ecuación 2.3** se obtiene que la primera derivada de la temperatura con respecto al tiempo representado por:

$$\frac{dT}{dt} = \frac{1}{mC_p} \left(h_{\infty}A(T - T_{\infty}) + \frac{dQ_s}{dt} \right) \quad (2.6)$$

Cuando no ocurre la solidificación ($\frac{dQ_s}{dt} = 0$), la primera derivada de la temperatura respecto al tiempo es definida como:

$$\frac{dT}{dt} = \frac{1}{mC_p} (h_\infty A(T - T_\infty)) = Z_N \quad (2.7)$$

Donde Z_N se le conoce como la curva cero de Newton. Con las **Ecuaciones 2.6** y **2.7** se puede obtener la evolución del calor generado durante la solidificación:

$$\frac{dQ_s}{dt} = mC_p \left[\left(\frac{dT}{dt} \right)_s - Z_N \right] \quad (2.8)$$

En la **Figura 2.9** se muestra un esquema del comportamiento de la curva de Newton, correspondiente a la línea C.

Al multiplicar el área entre las curvas por la masa y el C_p se puede determinar la entalpía de solidificación ΔH_s , la ecuación integral se muestra a continuación, delimitada desde el tiempo de inicio de solidificación (t_{ini}) hasta el fin de esta (t_{fin}).

$$\Delta H_s = mC_p \int_{t_i}^{t_{fin}} \left[\left(\frac{dT}{dt} \right)_s - Z_N \right] dt \quad (2.9)$$

Una vez determinada la entalpía de transformación se determina la fracción solidificada respecto a la integración de la **Ecuación 2.10** en cada segmento de tiempo (t) dividiendo con la entalpía total, mediante la ecuación:

$$f_s^t = \frac{1}{\Delta H_s} \int_{t_i}^t Q_s dt \quad (2.10)$$

Para implementar el método Newton se siguen los siguientes pasos:

- A) Se determinan los puntos de inicio y fin de solidificación partiendo de la observación de la primera derivada de la curva de enfriamiento.
- B) Se plantea una línea recta que liga los puntos de inicio y fin de la primera derivada.
- C) Calcular el área entre las curvas cero y la derivada experimental, empleando la Ecuación **2.7**.
- D) Por cada segmento de tiempo se determina el área entre las curvas y se evalúa la energía calorífica obtenida con la **Ecuación 2.8**.

En el caso del método de Fourier se necesita información de dos termopares a una distancia predeterminada entre ellos, así tomando en cuenta la presencia de gradientes térmicos durante el enfriamiento y la solidificación de la muestra. En este caso se resuelve la ecuación:

$$\frac{\partial T}{\partial t} = \alpha \nabla^2 T + \frac{1}{C_v} \frac{\partial Q}{\partial t} \quad (2.11)$$

Donde α es el coeficiente de difusividad térmica, C_v es el coeficiente de calor a volumen constante. Re-arreglando la ecuación, se puede estimar la curva base.

$$\frac{dQ_s}{dt} = mC_v \left[\left(\frac{dT}{dt} \right)_{ss} - \alpha \nabla^2 T \right] - mC_v \left[\left(\frac{dT}{dt} \right)_{ss} - Z_F \right] \quad (2.12)$$

La **Ecuación 2.12** muestra que es posible calcular el flujo instantáneo de calor latente si se conoce la derivada de la temperatura en función del tiempo, la curva cero de Fourier, lo cual

implica conocer los valores instantáneos de difusividad térmica (α) del laplaciano ($\nabla^2 T$) así como el C_v promedio de la aleación semisólida. Para evaluar dicha curva se supone la transferencia de calor unidireccional, definiendo el laplaciano como:

$$\nabla^2 T = \frac{4(T_2 - T_1)}{R_2^2 - R_1^2} \quad (2.13)$$

Para obtener el coeficiente de difusividad térmica se determina mediante la ecuación:

$$\alpha = \frac{\frac{dT}{dt}}{\nabla^2 T} \quad (2.14)$$

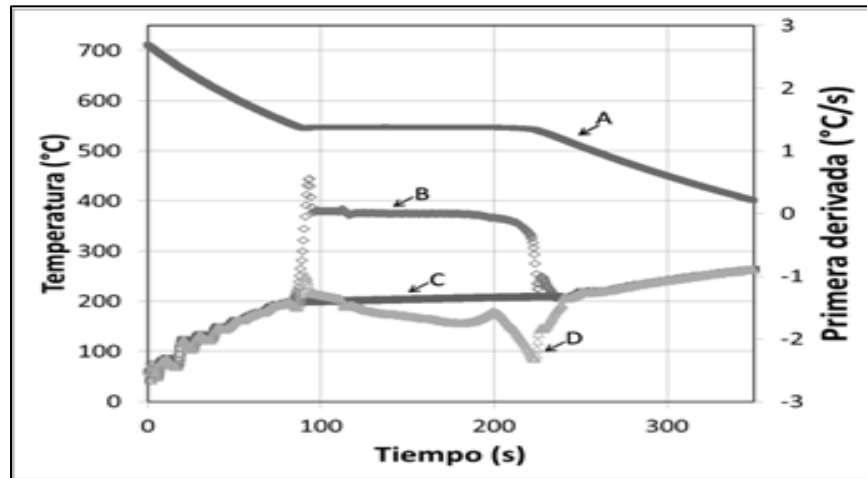


Figura 2.9 A) Grafico de la curva de enfriamiento, B) primera derivada de la temperatura en función del tiempo, C) curva cero de Newton y D) curva cero de Fourier.

El área entre la curva cero y la primera derivada de la temperatura respecto al tiempo (que es la integral de la resta de las dos funciones desde el tiempo de inicio, t_i , hasta el tiempo de fin de solidificación, t_{fin}) por el C_v promedio de la aleación bajo estudio proporciona el valor del calor latente de solidificación:

$$\Delta H_s = m C_v \int_{t_i}^{t_{fin}} \left[\left(\frac{dT}{dt} \right)_s - Z_F \right] \quad (2.15)$$

Para los dos métodos se cuantifica la fracción sólida evaluando el área acumulada a un cierto tiempo entre las curvas derivada y base, entre el área total, determinando la fracción sólida instantánea con la **Ecuación 2.10**.

Para determinar la evolución de la fracción sólida en función del tiempo siguiendo el método de Fourier se realiza iterativamente el siguiente procedimiento:

- A) Se asume una evolución lineal de la fracción sólida entre el tiempo de inicio y fin de la solidificación.
- B) Calcular la difusividad térmica y capacidad calorífica por unidad de volumen del metal durante la solidificación, en función del tiempo y de la fracción sólida estimada inicialmente, tomando como base los valores de obtenidos, **Ecuación 2.11**.
- C) Establecer la curva cero de Fourier, usando las **Ecuaciones 2.11 a 2.14**.

D) Se calcula el calor latente de solidificación integrando, desde el tiempo de inicio hasta el tiempo de fin de la solidificación con la **Ecuación 2.15**.

E) Se estima la evolución de la fracción sólida en función del tiempo, mediante la **Ecuación 2.10**.

F) Los pasos (B) a (E) se repiten hasta que el cálculo alcanza convergencia de calor latente actual y el calculado en el ciclo anterior, con un rango de variación menor a 0.1% de cada valor respecto al tiempo.

2.4 Desarrollo de una herramienta de validación: micro macro modelo de solidificación de aleaciones eutécticas e hipoeutécticas.

Con el propósito de validar los valores de los parámetros de crecimiento de grano obtenidos mediante la metodología propuesta, se desarrolló e implementó en un programa de cómputo con un micro macro modelo mecanístico capaz de simular curvas de enfriamiento en condiciones similares a las presentes durante la experimentación.

Para tal efecto el modelo es alimentado con la información experimental relativa a los parámetros determinados de crecimiento de grano mediante la metodología propuesta o también de los parámetros de crecimiento publicados en la literatura. También es alimentado con la densidad de granos determinada experimentalmente y con las condiciones de enfriamiento experimental caracterizadas por un coeficiente global de transferencia de calor extraído del procesamiento numérico de las curvas de enfriamiento experimentales

Se pretende simular curvas de enfriamiento de las muestras experimentales con el fin último de validar la pertinencia de los parámetros de crecimiento de grano obtenidos a partir de corroborar que tanto se acerca la curva simulada a la experimental cuando se emplea un modelo de crecimiento de grano específico, determinado por la metodología propuesta, o empleando parámetros de crecimiento reportados en la literatura o generados mediante el modelo LGK o JH modificado.

La comparación entre curvas de enfriamiento simuladas y experimentales para efectos de validación se realiza durante los momentos iniciales de la solidificación, entre el inicio de la solidificación pasando por el punto de máximo subenfriamiento y hasta el punto de máxima recalescencia para las aleaciones eutécticas. En el caso de las aleaciones hipoeutécticas Al-Cu, la comparación se realiza desde el inicio de la solidificación hasta el punto de coherencia dendrítica medido experimentalmente, ya que en ese momento se da el interbloqueo entre granos semisólidos en crecimiento y la solidificación continua a través del engrosamiento de los brazos dendríticos.

De acuerdo con lo anterior se implementó un micro-macro modelo de solidificación, conectando los aspectos macroscópicos de transferencia de calor con los aspectos microscópicos asociados a la cinética de la solidificación equiaxial eutéctica y dendrítica.

Las aleaciones estudiadas experimentalmente en este trabajo son las eutécticas Al-Si, Al-Cu y Al-Ni. También se estudió el crecimiento equiaxial dendrítico con tres aleaciones del sistema Al-Cu, específicamente las aleaciones hipoeutécticas Al-Cu con 3,4 y 5% en peso de Cu.

Estas aleaciones se eligieron por presentar una solidificación basada en la nucleación y el crecimiento de granos equiaxiales semisólidos que incrementarán su tamaño durante la solidificación, fenómeno que precisamente constituye el tema que interés a este trabajo. Se tomó como referencia el enfriamiento de la aleación líquida contenida en un molde metálico cilíndrico, aislado térmicamente en la base y en la tapa lo cual corresponde a las condiciones térmicas en las que se puede aplicar el análisis térmico de Fourier ya descrito en la sección anterior, que son precisamente las condiciones experimentales que serán exploradas en la parte experimental de este trabajo.



Figura 2.10 Sistema de bajo estudio para el cálculo de la transferencia de calor.

En la **Figura 2.10** se muestra un esquema del sistema bajo estudio. El método asume e intenta alcanzar experimentalmente a través del aislamiento en la parte superior e inferior del sistema, una transferencia de calor radial unidireccional. El coeficiente global de transferencia de calor que es obtenido a través del procesamiento numérico de las curvas de enfriamiento antes y después de la solidificación incluye la consideración del área de intercambio de calor entre la muestra metálica cilíndrica, inicialmente líquida y su entorno, intercambio representado por un coeficiente global de transferencia de calor y un entorno que se encuentra a la temperatura ambiente. Este coeficiente tiene en cuenta todas las resistencias térmicas presentes en el proceso de transferencia de calor unidimensional tal y como se define la transferencia de calor unidireccional por conducción a través de una pared compuesta [38]. Estas resistencias incluyen el espacio de aire entre la muestra y el molde asociado al resquicio o air gap, las resistencias térmicas asociadas con las capas externa e interna de pintura refractaria en la pared del molde, la resistencia térmica de la pared del molde metálico, y la resistencia asociada con la radiación y convección simultáneas que gobiernan la transferencia de calor de la superficie exterior del molde hacia los alrededores. Teniendo en cuenta que las resistencias térmicas cambian en función de la temperatura del sistema, para describir cuantitativamente el coeficiente global de transferencia de calor que describe el proceso de enfriamiento del sistema es necesario obtener ecuaciones numéricas que describan esta dependencia [116].

A continuación, se presenta el desarrollo del modelo y posteriormente se describirá la metodología empleada para la obtención del coeficiente global de transferencia de calor empleado por este modelo.

En la **Figura 2.11**, se muestran las dimensiones y la discretización de la muestra cilíndrica para el cálculo de la transferencia de calor.

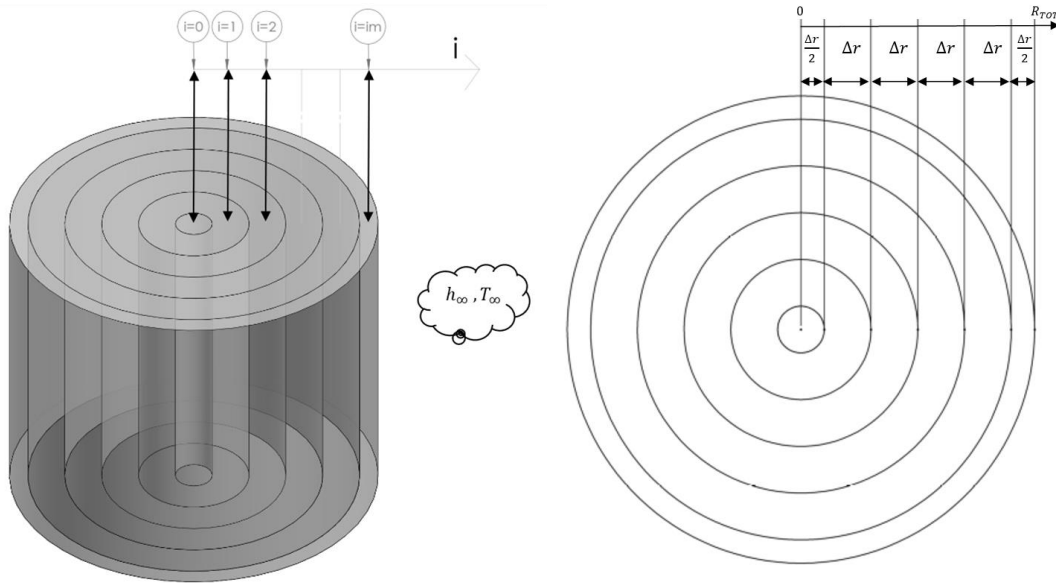


Figura 2.11 Discretización de la geometría de la muestra usada para el cálculo de la transferencia de calor.

El dominio de cálculo, representado esquemáticamente en la **Figura 2.10**, consiste de una muestra metálica cilíndrica de aleación eutéctica o hipoeutéctica base Al, inicialmente líquida, que presenta una tapa y una base aisladas térmicamente y que se enfría de manera radial, transfiriendo calor a través de su frontera ubicada en la posición radial $r=R_{TOT}$ hacia un medio que se encuentra a una temperatura T_{∞} , mediante un mecanismo combinado de transferencia de calor por convección y radiación representado mediante un coeficiente global de transferencia de calor h_{∞} .

En este trabajo se asume que, durante el enfriamiento y la solidificación de la muestra metálica, el principal mecanismo de transferencia de calor es la conducción. En consecuencia, la conservación de energía en el sistema bajo estudio es representada por la ecuación general de conducción:

$$\rho C_p \frac{\partial T}{\partial t} = \nabla \{k \nabla T\} + Q_s \quad (2.16)$$

Donde ∇ es el vector nábla, T es el campo de temperaturas en función de la posición y del tiempo, k es la conductividad térmica del material bajo estudio, ρ es la densidad, C_p es la capacidad calorífica, Q_s es el flujo de calor latente liberado por la solidificación por unidad de volumen.

Donde:

$$\Delta H_s \frac{\partial f_s}{\partial t} = Q_s \quad (2.17)$$

Expresando la **Ecuación 2.16** en coordenadas cilíndricas, caso unidimensional, en la dirección radial, y asumiendo propiedades termo físicas constantes se obtiene lo siguiente:

$$\rho C_p \frac{\partial T}{\partial t} = k \frac{1}{r} \left(r \frac{\partial T}{\partial r} \right) + \Delta H_s \frac{\partial f_s}{\partial t} \quad (2.18)$$

El término de generación de calor latente de solidificación, Q_s es proporcionado por el modelo microscópico de cinética de solidificación y es implementado en el dominio ocupado por la muestra metálica durante la solidificación. Para caracterizar el sistema bajo estudio se consideraron las siguientes condiciones límite e iniciales.

- i) En el eje de simetría, condición de simetría.

$$k \frac{\delta T}{\delta r}_{r=0} = 0 \quad (2.19)$$

- ii) En la intercara metal /medio de enfriamiento:

$$k \frac{\delta T}{\delta r}_{r=R} = h_{\infty}(T_s - T_{\infty}) \quad (2.20)$$

El coeficiente h_{∞} es un coeficiente global combinado de transferencia de calor que describe el transporte de energía de la muestra hacia sus alrededores, el cual es obtenido de las curvas de enfriamiento experimentales con el propósito de realizar las simulaciones en condiciones de enfriamiento similares a las presentes durante la experimentación, T_{∞} corresponde a la temperatura de los alrededores, T_s es la temperatura de la superficie metal-medio de enfriamiento y R es el radio total de la muestra metálica.

- iii) Las condiciones iniciales, de temperatura en función de la posición y del tiempo, $T(r, t)$ son las siguientes en el dominio del metal.

$$T(0 \leq r \leq R, t = 0) = T_m \quad (2.21)$$

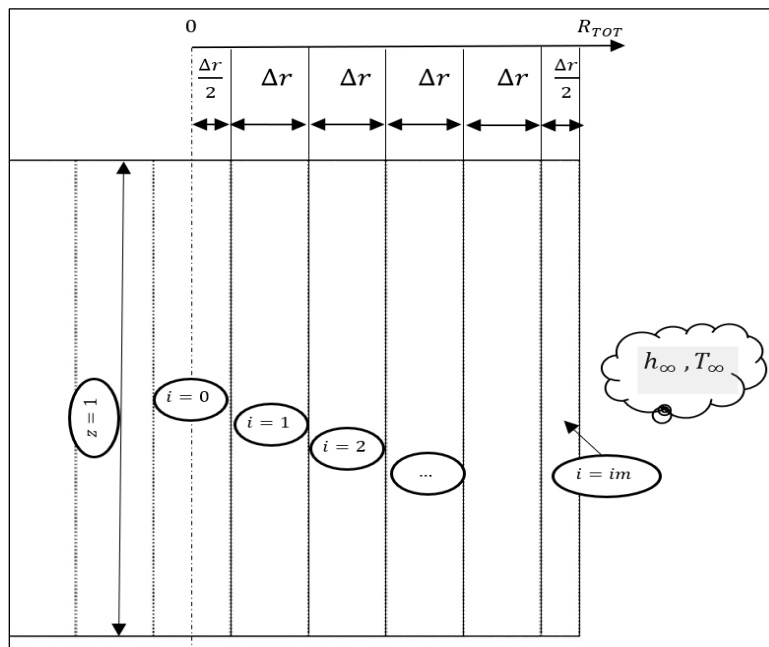


Figura 2.12 Esquema de la discretización del sistema.

Para resolver la **Ecuación 2.18** se empleó el método de diferencias finitas implícito, aplicando la siguiente metodología:

- a) Discretización del sistema. Se discretizó el sistema metálico bajo estudio, en un conjunto de elementos de volumen o micro volúmenes, en donde, dentro de cada uno se considera que la temperatura es uniforme, como se muestra la **Figura 2.12** Esquema de la discretización del sistema.
- b) **2.12.** Se adoptó un tamaño de malla o espesor radial característico, Δr , para los elementos nodales al interior del dominio del metal, y $\Delta r/2$ para los dos elementos únicos ubicados en el eje de simetría y en la intercara metal/ medio de enfriamiento, y una altura unitaria, $z = 1$, lo cual se representa esquemáticamente en la **Figura 2.12**.
- c) Tipificación del sistema bajo estudio. El sistema está constituido por tres tipos de volúmenes de control, dos de tipo único: los elementos que se ubican en el eje de simetría y en la intercara metal/ medio de enfriamiento, así como los elementos de la familia nodal presente en el seno del metal. En las **Figuras 2.13 a 2.16** se muestran las representaciones esquemáticas de cada tipo de volumen de control.
- d) Deducción de las ecuaciones nodales para cada tipo de volumen de control, incluyendo el término de generación de calor latente. Este término es no nulo exclusivamente durante la solidificación y se calcula empleando el modelo cinético de solidificación que corresponda para estimar el incremento en fracción sólida local en el paso de tiempo. Las ecuaciones nodales fueron obtenidas a partir de las expresiones que resultan de aplicar un balance de energía para cada tipo de elemento de control.
- e) Generación del sistema de ecuaciones simultáneas que representa al sistema compuesto metal molde, en función de la discretización del sistema y del último campo de temperaturas disponible. Durante la solidificación, el cambio local en fracción sólida realizado en un intervalo de tiempo es calculado explícitamente al inicio de cada paso del tiempo empleando al último campo de temperatura para los cálculos realizados por el modelo cinético de solidificación. Los resultados así obtenidos de incremento en fracción sólida son empleados durante el cálculo del nuevo campo de temperaturas para determinar la contribución de la generación de calor latente local.
- f) Solución del sistema de ecuaciones simultáneas resultante de plantear todas las ecuaciones nodales que representan al sistema discretizado [117]. El sistema de ecuaciones se representa matricialmente por el producto de una matriz de coeficientes tridiagonal multiplicado por el vector columna del perfil de nuevas temperaturas, que resulta en un vector columna de resultados y su solución se realiza aplicando el algoritmo de Thomas.
- g) Registro de resultados y actualización de parámetros para el siguiente paso de cálculo.
- h) Repetición de los pasos (d) a (f) hasta el final del cálculo marcado cuando todos los nodos tienen una temperatura menor a 200°C.

Finalmente, y a continuación, se muestran las ecuaciones nodales de cada tipo de volumen de control:

1. Elemento único en el eje de simetría del metal.

La **Figura 2.13** muestra el esquema del nodo central, identificado por el índice nodal "**i = 0**", un cilindro de radio $r = \frac{\Delta r}{2}$. La transferencia de calor de este nodo se dirige hacia el nodo vecino inmediato, identificado por el índice nodal "**i = 1**".

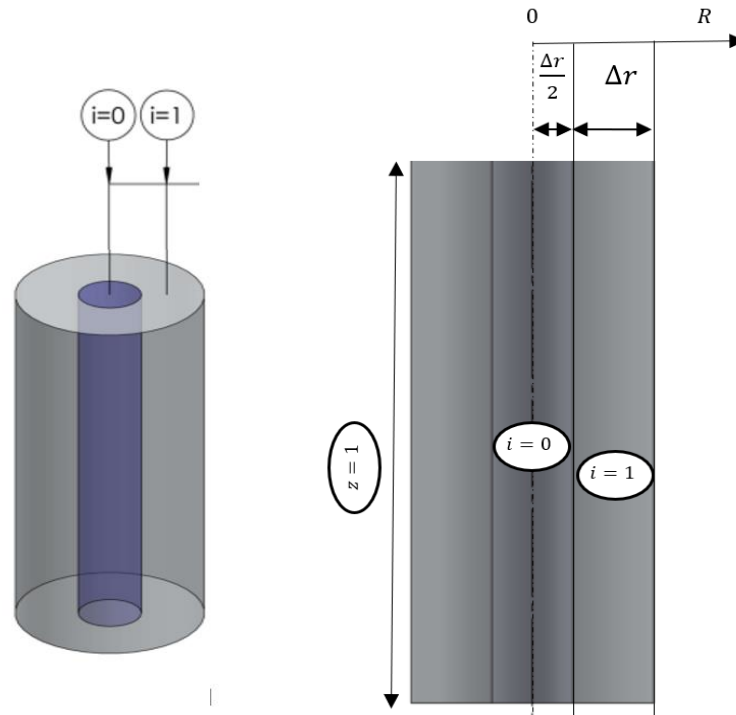


Figura 2.13 Representación de los parámetros del nodo central.

La ecuación que rige el sistema de nodo central es la siguiente:

$$\left\{1 + \frac{1}{4Fo}\right\} T_0^t - T_1^t = T_0^{t+\Delta t} \left(\frac{1}{4Fo}\right) + \frac{\Delta H_s \Delta f_s}{4Fo C_p} \quad (2.22)$$

Siendo $Fo = \frac{\alpha \cdot \Delta t}{\Delta R^2}$, corresponde al número de Fourier, α es la difusividad térmica del metal y Δt es el paso de tiempo de cálculo.

2. Elementos de la familia nodal presente en el seno del metal.

La **Figura 2.14** presenta el esquema de un nodo típico perteneciente a la familia de nodos en el dominio del metal. Estos se encuentran entre el nodo único central y el nodo único de la intercara metal/medio exterior. Esta familia de nodos está constituida por cilindros huecos con un espesor radial Δr y una altura Z unitaria y se identifican con índices nodales “ i ” que van de $i = 1$ hasta $i = im - 1$ donde “ im ” es el índice nodal máximo que resulta de discretizar el dominio de cálculo, un cilindro de radio $r = R_{TOT}$ y altura $Z = 1$ cuando es discretizado empleando un tamaño de malla Δr .

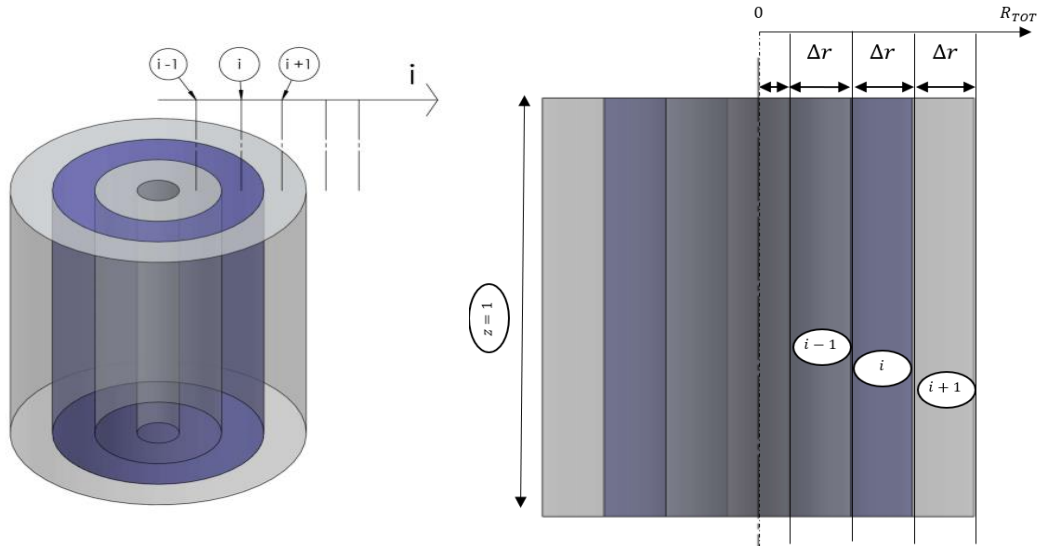


Figura 2.14 Representación de los parámetros de los nodos encontrados en el seno del metal.

La ecuación que rige la familia de nodos del seno del metal es:

$$-T_{i-1}^{t+\Delta t} \left\{ 1 - \frac{1}{2i} \right\} + T_i^{t+\Delta t} \left\{ 2 + \frac{1}{Fo} \right\} - T_{i+1}^{t+\Delta t} \left\{ 1 + \frac{1}{2i} \right\} = T_i^t \left\{ \frac{1}{Fo} \right\} + \frac{\Delta H_s \Delta f_s}{Fo C_p} \quad (2.23)$$

3. Elemento nodal único de la intercara metal/molde.

En la **Figura 2.15** se presenta el esquema del elemento nodal único de la intercara metal/molde, el cual es un cilindro hueco de espesor radial $\frac{\Delta r}{2}$ y altura z unitaria que tiene contacto con el elemento $i = im - 1$ del seno del metal en su cara interior y contacto con el medio de enfriamiento exterior y es caracterizado por el índice nodal máximo $i = im$.

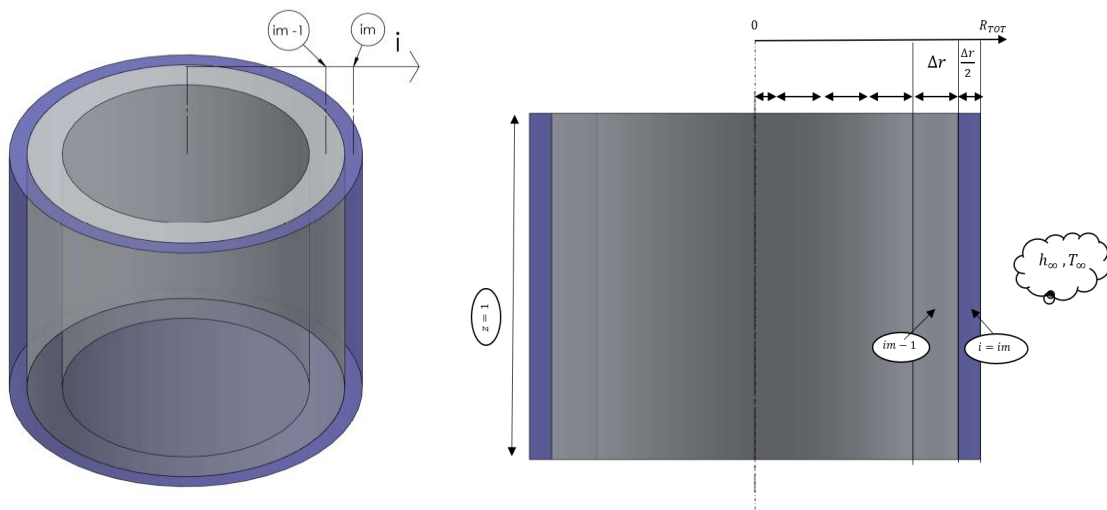


Figura 2.15 Representación de los parámetros del nodo de la interfaz metal/molde.

La ecuación que rige al nodo único de la intercara metal/molde es:

$$-T_{i-1}^{t+\Delta t} \left\{ \frac{1}{2i} - 1 \right\} + T_i^{t+\Delta t} \left\{ \frac{1}{2Fo} + \left(1 - \frac{1}{2i} \right) + Bi \right\} = T_i^t \left(\frac{1}{2Fo} \right) + BiT_\infty + \frac{\Delta H_s \Delta f_s}{2Fo Cp} \quad (2.24)$$

Donde $Bi = \frac{h_\infty \Delta r}{k}$, es el número de Biot y durante la solidificación la conductividad térmica es la suma ponderada de las fases sólida y líquida: $k = k_s(f_s) + k_l(1 - f_s)$.

Durante la solidificación, también la difusividad térmica y la capacidad calorífica se determinan como la suma ponderada de las propiedades usando como factor de ponderación la fracción sólida: $\alpha = \alpha_s(f_s) + \alpha_l(1 - f_s)$, $C_p = C_{p,s}(f_s) + \alpha_l(1 - f_s)$.

En el **Anexo II** se presenta la deducción detallada de las ecuaciones nodales.

2.4.1 Modelo microscópico de cinética de solidificación de una aleación eutéctica.

A continuación, se describe la fenomenología característica que se presenta a nivel microscópico en una aleación de tipo eutéctica. Se caracterizan 3 etapas principales (Ver **Figura 2.16**), la primera (I) corresponde al enfriamiento del líquido, la segunda (II) corresponde al enfriamiento y solidificación, finalizando con una tercera (III) que es el enfriamiento del sólido.

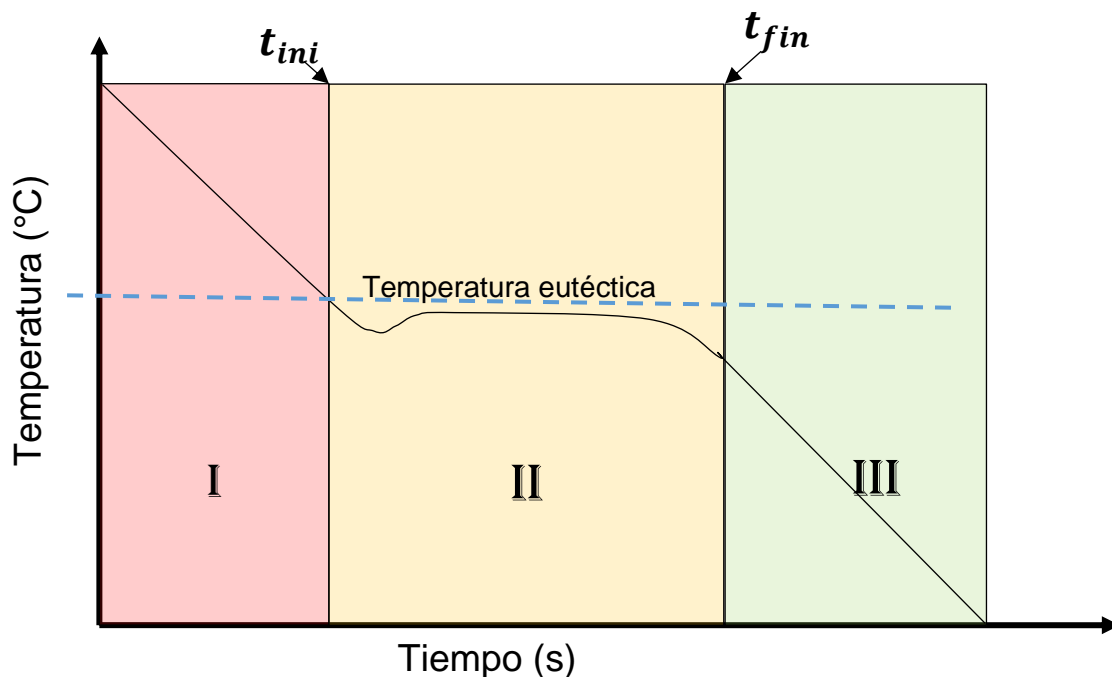


Figura 2.16 Etapas de enfriamiento y transformación de una curva típica de tipo eutéctica.

Etapa I. Enfriamiento del líquido. Durante esta etapa, que corresponde al intervalo de tiempo comprendido entre el inicio del proceso de enfriamiento del líquido sobrecalentado y el tiempo t_{ini} , tiempo en el cual la zona monitoreada por el termopar alcanza la temperatura eutéctica y que marca el inicio de transformación de líquido a sólido. Durante esta etapa la muestra transfiere hacia sus alrededores el calor sensible asociado al sobrecalentamiento inicial.

Etapa II. Durante esta etapa, que se presenta en el intervalo de tiempo comprendido entre el tiempo de inicio de solidificación t_{ini} y el tiempo de fin de solidificación, t_{fin} es donde se efectúa la solidificación del microconstituyente eutéctico.

Cuando la temperatura de la aleación cae por debajo de la temperatura eutéctica, inicia la solidificación del microconstituyente eutéctico, comenzando con la nucleación y siguiendo con el crecimiento de los granos.

En un instante dado durante esta etapa, N_e esferas de microconstituyente eutéctico, cuyo número ha sido establecido a partir de determinaciones metalográficas, crecen de acuerdo con un radio promedio instantáneo que se calcula por los modelos de crecimiento eutéctico.

Para modelar la cinética de crecimiento de los granos eutécticos se emplea la **Ecuación 2.25**

$$\frac{dR_e}{dt} = \mu_e \Delta T_e^{n_e} \quad (2.25)$$

Donde μ_e y n_e son los parámetros determinados experimentalmente para cada tipo de eutéctico por los métodos analizados, los parámetros reportados en la literatura o bien los parámetros calculados por el modelo de Jackson y Hunt modificado por Magnin [73].

El subenfriamiento eutéctico, ΔT_e se calcula mediante la ecuación:

$$\Delta T_e = T_e - T_M \quad (2.26)$$

Donde T_M es la temperatura instantánea del metal y T_E es la temperatura eutéctica.

Durante esta etapa, el sólido presente en cada elemento de control dentro del dominio de metal puede ser representado por un conjunto de esferas sólidas de microconstituyente eutéctico.

La fracción sólida extendida presente en un elemento de control se obtiene de la ecuación:

$$f_s^{ex} = \frac{4}{3} \pi N_e R_e^3 \quad (2.27)$$

Derivando con respecto al tiempo en la **Ecuación 2.27** y despreciando la variación de N_e con respecto al tiempo, se obtiene la ecuación:

$$\frac{\partial f_s}{\partial t} = \left(4\pi N_e R_e^2 \frac{\partial R_e}{\partial t} \right) \quad (2.28)$$

Esta expresión, que permite calcular a la velocidad de solidificación, no toma en cuenta a la interacción de interbloqueo que existe entre las esferas sólidas en crecimiento, lo cual implica que las esferas sólidas mencionadas pueden crecer libremente de acuerdo con su correspondiente modelo de crecimiento. Sin embargo, conforme se incrementa la fracción sólida, la probabilidad de que las esferas sólidas en crecimiento interactúen a través de campos térmicos aumenta. La consecuencia de tal interacción es una restricción mutua

para un posterior crecimiento. Es necesario tomar en cuenta el interbloqueo entre ambos tipos de grano en crecimiento por lo cual se presenta el siguiente desarrollo.

En esta etapa, se emplea la ecuación de Johnson-Mehl, modificada para el caso de crecimiento simultáneo de granos de un microconstituyente, la suposición principal es asumir que conforme a la fracción sólida tiende a la unidad se tiende a una interacción de interbloqueo entre granos, de tal manera que la velocidad de solidificación tiende a cero. Esto se expresa matemáticamente multiplicando la velocidad de solidificación expresada en la **Ecuación 2.29**, por el factor de empalmamiento $(1 - f_s)$:

$$\frac{\partial f_s}{\partial t} = \left(4\pi N_e R_e^2 \frac{\partial R_e}{\partial t}\right) (1 - f_s) \quad (2.29)$$

En un periodo de tiempo Δt , durante esta etapa, el incremento infinitesimal en fracción sólida, ∂f_s , puede obtenerse de:

$$\partial f_s = (4\pi N_e R_e^2 \partial R_e)(1 - f_s) \quad (2.30)$$

La **Ecuación 2.30** puede expresarse como:

$$\partial f_s = (\partial f_e^t)(1 - f_s) \text{ siendo } \partial f_e^t = 4\pi N_e R_e^2 \partial R_e \quad (2.31)$$

Resolviendo analíticamente en la **Ecuación 2.31** se obtiene

$$\ln(1 - f_s) = - \left[\frac{4}{3} \pi N_e R_e^3 \right] \quad (2.32)$$

De tal manera que la fracción sólida instantánea durante esta etapa, tomando en cuenta a la interacción entre granos es:

$$f_s = 1 - \exp[-f_{s,e}^{ex}] \quad (2.33)$$

El incremento de la fracción sólida, Δf_s , durante esta etapa puede describirse como

$$\Delta f_s = f_s^{t+dt} - f_s^t \quad (2.34)$$

Lo anterior también puede calcularse a partir del incremento en fracción sólida extendida de la siguiente manera

$$\Delta f_s = \Delta f_{s,e}^{ex} \exp(-f_{s,e}^{ex}) \quad (2.35)$$

La densidad de granos eutécticos, N_e es obtenida de la información experimental de densidad de granos adquirida por métodos metalográficos para las tres velocidades de enfriamiento empleadas en las muestras experimentales de aleación eutéctica.

La etapa II termina en el momento en que se agota el líquido remanente lo cual se asume sucede cuando $f_s = 0.999$, luego de lo cual inicia la etapa 3, de enfriamiento del sólido.

Etapa III. Esta etapa ocurre posterior al proceso de solidificación, corresponde a los tiempos posteriores al fin de solidificación, t_{fin} y en esta etapa se realiza el enfriamiento de la aleación sólida.

2.4.2 Modelo microscópico de cinética de solidificación de una aleación hipoeutéctica.

En el modelo elaborado se asume que las aleaciones hipoeutécticas base aluminio están formadas por 2 microconstituyentes principales:

-La fase α , que se forma al inicio de la solidificación y que es una solución sólida rica en aluminio en presencia de un soluto equivalente, principalmente Cu, que se presenta en condiciones existentes durante el enfriamiento y solidificación en medio de enfriamiento, como dendritas equiaxiales representadas por esferas sólidas equivalentes.

-El microconstituyente eutéctico, que se presenta como granos esféricos de eutéctico Al-Cu. Para que ambos microconstituyentes sean incorporados en la simulación de las curvas de enfriamiento del sistema, se requiere para cada microconstituyente considerar la nucleación y el crecimiento.

En la **Figura 2.17** se muestra a una curva de enfriamiento, típica, asociada al enfriamiento y solidificación de una aleación hipoeutéctica. En el modelo elaborado se consideran cinco etapas presentes durante el proceso de enfriamiento y solidificación.

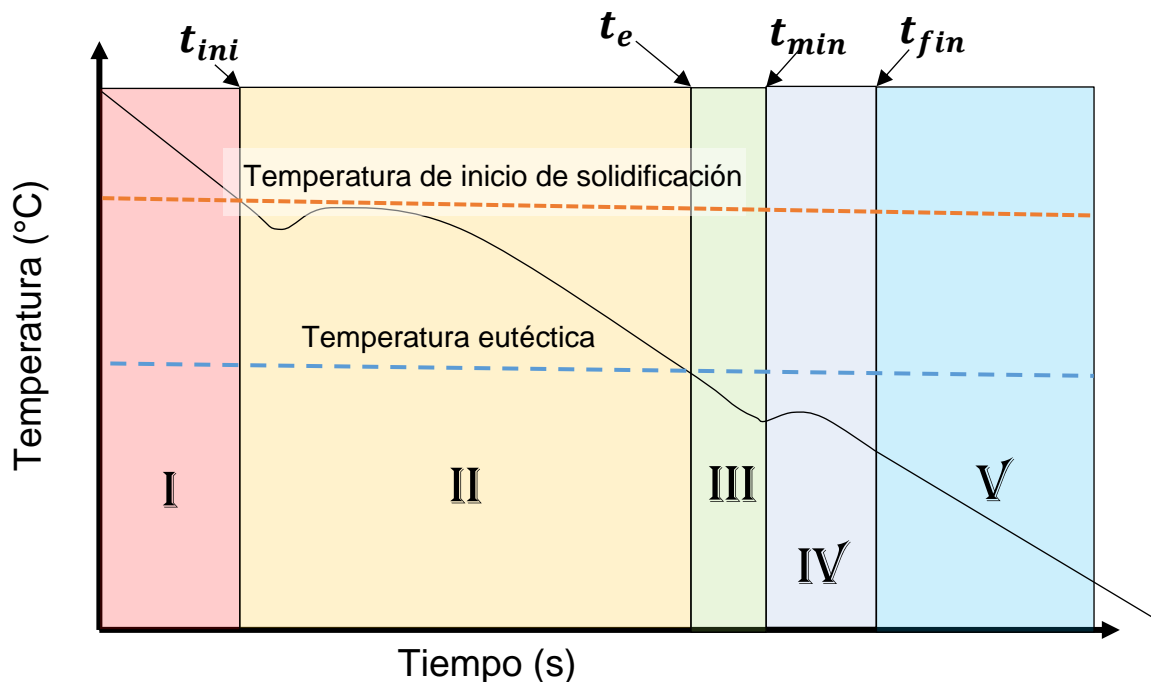


Figura 2.17 Etapas de enfriamiento y transformación de una curva típica de enfriamiento y solidificación de una aleación hipoeutéctica.

El modelo elaborado en este trabajo asume que el proceso de enfriamiento y solidificación de la aleación bajo estudio consta de cinco etapas:

Etapa I. Enfriamiento del líquido. Durante esta etapa, que corresponde al intervalo de tiempo comprendido entre el inicio del proceso de enfriamiento del líquido sobrecalentado y el tiempo t_{ini} , tiempo en el cual la zona monitoreada por el termopar alcanza la

temperatura de liquidus T_L y que marca el inicio de transformación de líquido a sólido. Durante esta etapa la muestra transfiere hacia sus alrededores el calor sensible asociado al sobrecalentamiento inicial.

Como las aleaciones experimentales hipoeutécticas fueron elaboradas a partir de metales de pureza comercial, que presentan ciertas cantidades de microaleantes para modelar mejor la temperatura de liquidus y con esto comparar más adecuadamente las curvas de enfriamiento simuladas con las experimentales, es necesario considerar a las aleaciones hipoeutécticas base Al-Cu como de composición química multicomponente, considerando el efecto de la modificación del valor operante de la temperatura de inicio de solidificación también conocida como temperatura de liquidus T_L , en el modelo elaborado, que en la **Figura 2.17** se presenta en el tiempo t_{ini} . La temperatura de liquidus T_L multicomponente resulta de sustituir, en la ecuación de la línea líquidus al sistema equivalente Al-X (Ver **Figura 2.18**), la composición del líquido en equilibrio con la solución sólida saturada en X, que es el soluto equivalente:

$$T_L = T_F + \bar{m}_l \left(\frac{C_{0,eq}}{\bar{k}_{eq}} \right) \quad (2.36)$$

Donde T_F , es la temperatura de fusión del aluminio, \bar{m}_l es el promedio ponderado de las pendientes liquidus de los componentes, $C_{0,eq}$ es la concentración inicial promedio y \bar{k}_{eq} es el coeficiente de distribución del soluto equivalente.

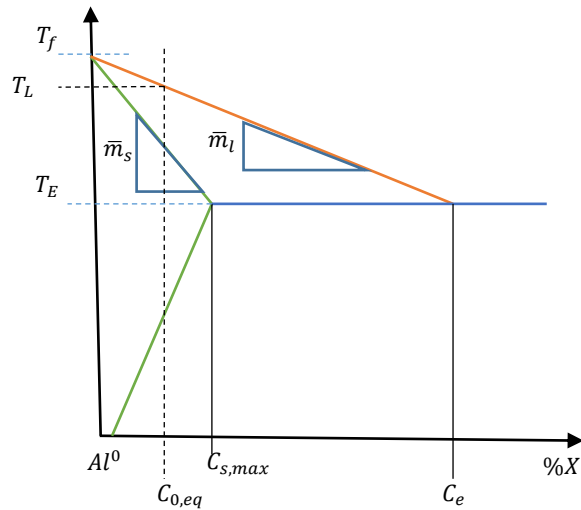


Figura 2.18 Representación esquemática del diagrama de fases asociado al sistema Al-X, en donde se muestran los parámetros que caracterizan a la ruta de solidificación al equilibrio de una aleación hipoeutéctica de una composición dada.

Para el cálculo de la **Ecuación 2.36**, se emplean las expresiones propuestas por Wang *et al* [118]. La pendiente de líquidus asociada al soluto equivalente, \bar{m}_l , se calcula como el promedio ponderado de las pendientes de líquidus soluto, m_i , de cada componente individual empleando la ecuación:

$$\bar{m} = \frac{\sum m_i C_{0,i}}{\sum C_{0,i}} \quad (2.37)$$

El coeficiente de distribución de soluto equivalente, k_{eq} , se calcula ampliando la siguiente expresión:

$$k_{eq} = \frac{\sum(k_0 C_{0,i} m_i)}{\sum(C_{0,i} m_i)} \quad (2.38)$$

La concentración inicial del soluto equivalente que se calcula sumando las concentraciones iniciales, $C_{0,i}$, de todos los solutos presentes en la aleación

$$C_{0,eq} = \sum C_{0,i} \quad (2.39)$$

La solubilidad máxima de soluto equivalente en la solución sólida, $C_{s,eq}$, se calcula empleando la ecuación:

$$C_{s,eq} = \frac{\sum(C_{s,i} C_{0,i})}{\sum C_{0,i}} \quad (2.40)$$

Los valores de los coeficientes de partición, $k_{0,i}$, y de las pendientes líquidas, m_i , empleados para los cálculos realizados por el modelo elaborado se enlistan en la **tabla 2.2**.

Tabla 2.2 Valores de $k_{0,i}$ y m_i , empleados en el modelo.

Soluto	$k_{0,i}$	m_i	Referencia.
Si	0.117	-6.587	Rappaz y Thevoz, 1987 [119].
Mg	0.420	-5.980	Kanetkar, 1988 [120].
Fe	0.022	-2.950	Kanetkar, 1988 [120].
Cu	0.170	-3.430	Kanetkar, 1988 [120].

Etapa II. Esta etapa inicia en el tiempo t_{ini} cuando el líquido en enfriamiento alcanza la temperatura de liquidus y finaliza en el tiempo t_e , cuando el sistema en enfriamiento alcanza la temperatura eutéctica.

En esta etapa se efectúa la nucleación y el crecimiento de los granos equiaxiales dendríticos de la fase primaria “ α ”.

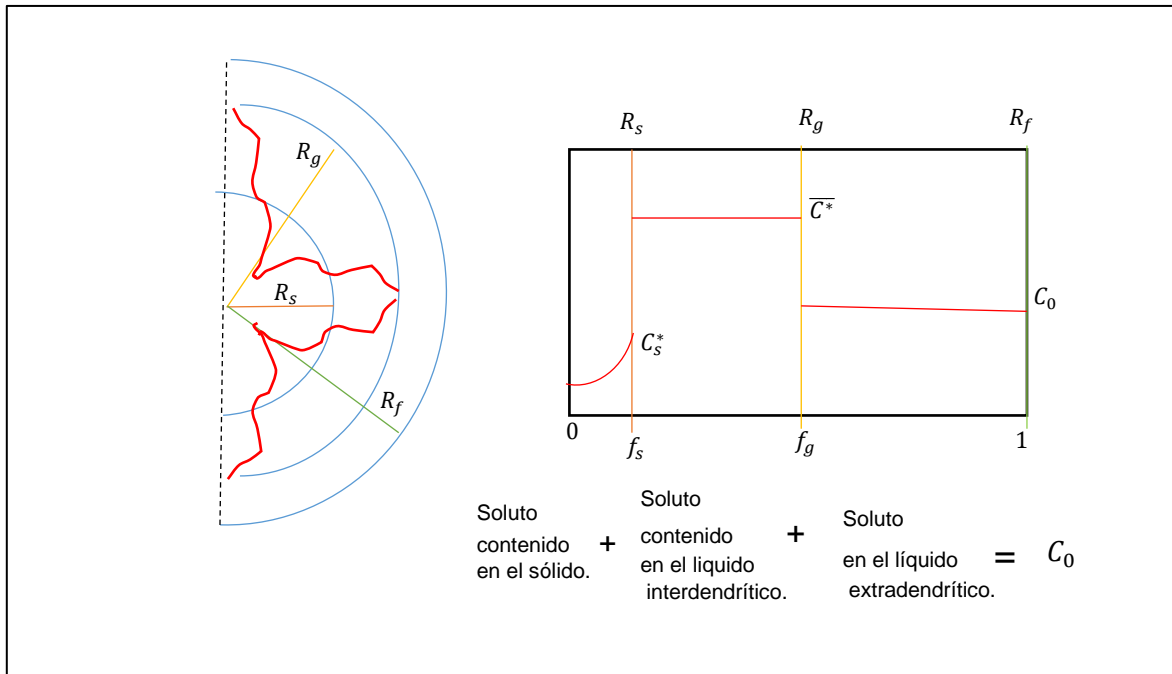


Figura 2.19 Representación esquemática de los radios característicos y el reparto de soluto durante el crecimiento dendrítico.

Al inicio de esta etapa, los granos dendríticos en crecimiento son semisólidos. Se asume que estos granos pueden ser caracterizados por tres radios, mostrados esquemáticamente en la **Figura 2.19**: i) El radio de grano final, R_f , establecido por la densidad de granos medidos experimentalmente; ii) radio que delimita a la envolvente exterior del grano semi sólido en crecimiento, establecido por la posición de la punta dendrítica, R_g ; iii) Radio de la esfera sólida equivalente, R_s , la cual contiene la misma cantidad de sólido que el grano semisólido del radio R_g .

Se consideraron los siguiente supuestos: 1) en el líquido interdendrítico, ubicado en la región comprendida entre R_g y R_s , la concentración del soluto equivalente corresponde a la composición del equilibrio en la intercara sólido-líquido, \bar{C}^* , obtenido del modelo de Scheil aplicado al sistema equivalente Aluminio-X; 2) en el sólido extradendrítico, ubicado entre R_f y R_g la cantidad de soluto presente corresponde a la concentración inicial del soluto equivalente, C_0 ; 3) la punta dendrítica se desplaza bajo el efecto del sub enfriamiento, de acuerdo con el modelo de crecimiento de grano con los parámetros de crecimiento μ y n determinados experimentalmente, por valores de estos parámetros reportados en la literatura o bien por la ecuación de crecimiento de grano obtenida de aplicar la versión multi componente del modelo LGK. El subenfriamiento considerado para calcular la velocidad de crecimiento de la punta dendrítica se calcula considerando \bar{C}^* , y a la concentración promedio de soluto equivalente X presente en los líquidos interdendrítico y extradendrítico obtenido al aplicar un modelo de micro segregación.

La proporción entre R_g , el radio instantáneo de grano semisólido, y R_s , el radio de la esfera sólida equivalente está restringida por consideraciones de conservación de materia resumidas por la ecuación de balance de masa mostrado en la **Figura 2.19**.

Cuando se emplea el modelo de Scheil [120] para describir la microsegregación de soluto durante esta etapa el balance de soluto está dado por:

$$\bar{C}_0(1 - (1 - f_s))^{k_e} + (f_g - f_s)\bar{C}^* + (1 - f_g)\bar{C}_o = \bar{C}_0 \quad (2.41)$$

Donde f_g es la fracción de grano:

$$f_g = \left(\frac{R_g}{R_r}\right)^3 \quad (2.42)$$

En tanto la fracción sólida es de la fase α es:

$$f_s = \left(\frac{R_s}{R_f}\right)^3 \quad (2.43)$$

La solución numérica de la **Ecuación 2.30** permite conocer el radio equivalente del sólido que corresponde a un valor conocido R_g , empleando el concepto de fracción interna de grano:

$$f_i = \left(\frac{R_s}{R_g}\right)^3 \quad (2.44)$$

Durante el crecimiento dendrítico, etapa 2, se asume que crecen N_α esferas sólidas equivalentes, cuya densidad de núcleos es determinada metalográficamente como se explica en el **Capítulo 3**.

Esta información sobre N_α es empleada por el micromodelo para calcular la evolución de la fracción sólida durante esta etapa. El radio de la esfera sólida equivalente es determinado mediante la ecuación:

$$R_s^t = \left(\frac{f_s^t}{4\pi N_\alpha}\right)^{\frac{1}{3}} \quad (2.45)$$

El incremento del radio de la esfera equivalente, ΔR_s , es calculado a partir del conocimiento del incremento del radio de grano, ΔR_g , y de la fracción interna del grano que resulta de la **Ecuación 2.30**, empleando la siguiente relación geométrica.

$$\Delta R_s = \Delta R_g (f_i)^{\frac{1}{3}} \quad (2.46)$$

El subenfriamiento durante esta etapa es determinado mediante la ecuación:

$$\Delta T_\alpha = T_\alpha - T_L \quad (2.47)$$

Donde T_L es la temperatura instantánea de liquidus calculada considerando, \bar{C}^* , la concentración instantánea promedio de soluto equivalente X en el líquido interdendrítico y T_α es la temperatura instantánea del metal. Para modelar la cinética de crecimiento de las esferas sólidas equivalentes se emplea la ecuación:

$$\frac{dR_s}{dt} = \mu_\alpha \Delta T_\alpha^{n_\alpha} \quad (2.48)$$

Los coeficientes μ_α y n_α son los determinados por la metodología propuesta, o empleando parámetros de crecimiento reportados en la literatura o generados mediante el modelo LGK.

Etapa III. Durante esta etapa, que se realiza en el intervalo de tiempo comprendido entre t_e y t_{fin} , se efectúa la solidificación simultánea de fase primaria y de microconstituyente eutéctico.

Cuando la temperatura de la aleación cae por debajo de la temperatura eutéctica, continúa creciendo la fase primaria y simultáneamente a partir de este momento inicia la solidificación del microconstituyente eutéctico, comenzando con la nucleación y sigue con el crecimiento de granos.

Para modelar la cinética de crecimiento de los granos eutécticos emplea la **Ecuación 2.49**

$$\frac{dR_e}{dt} = \mu_e \Delta T_e^{n_e} \quad (2.49)$$

Donde μ_e y n_e son los parámetros determinados experimentalmente para cada tipo de eutéctico, los parámetros reportados en la literatura o bien los parámetros calculados por el modelo de Jackson y Hunt modificado.

El subenfriamiento eutéctico, ΔT_e se calcula mediante la ecuación:

$$\Delta T_e = T_e - T_L \quad (2.50)$$

Durante esta etapa, el sólido presente en cada elemento de control dentro del dominio de metal puede ser representado por un conjunto de esferas sólidas de dos tipos diferentes: i) esferas sólidas de fase primaria; ii) esferas sólidas de microconstituyente eutéctico.

En un instante dado, durante esta etapa, en una parte del volumen del sistema que representa la situación presente del elemento de control, N_A , esferas de fase primaria y N_e esferas de microconstituyente eutéctico, cuyo número ha sido establecido a partir de determinaciones metalográficas y con un radio promedio que ha sido calculado por los modelos de crecimiento dendrítico y eutéctico respectivamente.

Las fracciones sólidas extendidas de ambos, presentes en un elemento de control se obtienen de la ecuación:

$$f_s^{ex} = \frac{4}{3} N_a R_s^3 + \frac{4}{3} \pi N_e R_e^3 \quad (2.50)$$

Derivando con respecto al tiempo en la **Ecuación 2.42** y despreciando la variación de \hat{N}_e con respecto al tiempo, se obtiene la ecuación:

$$\frac{\partial f_s}{\partial t} = \left(4\pi N_a R_a^2 \frac{\partial R_s}{\partial t} + 4\pi N_e R_e^2 \frac{\partial R_e}{\partial t} \right) \quad (2.51)$$

Esta expresión, que permite calcular a la velocidad de solidificación, no toma en cuenta a la interacción de interbloqueo que existe entre las esferas sólidas en crecimiento, lo cual implica que las esferas sólidas mencionadas pueden crecer libremente de acuerdo con su correspondiente modelo de crecimiento. Sin embargo, conforme se incrementa la fracción sólida, la probabilidad de que las esferas sólidas en crecimiento interactúen a través de campos térmicos o solutales aumenta. La consecuencia de tal interacción es una restricción mutua para un posterior crecimiento. Es necesario tomar en cuenta el interbloqueo entre ambos tipos de grano en crecimiento por lo cual se presenta el siguiente desarrollo.

En esta etapa, se emplea la ecuación de Johnson-Mehl, modificada para el caso de crecimiento simultáneo de dos microconstituyentes, la suposición principal es asumir que conforme a la fracción sólida tiende a la unidad se tiende a una interacción de interbloqueo entre granos, de tal manera que la velocidad de solidificación tiende a cero. Esto se expresa matemáticamente multiplicando la velocidad de solidificación expresada en la **Ecuación 2.52**, por el factor de empalmamiento $(1 - f_s)$:

$$\frac{\partial f_s}{\partial t} = \left(4\pi N_a R_a^2 \frac{\partial R_s}{\partial t} + 4\pi N_e R_e^2 \frac{\partial R_e}{\partial t} \right) (1 - f_s) \quad (2.52)$$

En un periodo de tiempo ∂t , durante esta etapa, el incremento infinitesimal en fracción sólida, ∂f_s , puede obtenerse de:

$$\partial f_s = (4\pi N_a R_a^2 \partial R_a + 4\pi N_e R_e^2 \partial R_e)(1 - f_s) \quad (2.53)$$

La **Ecuación 2.53** puede expresarse como:

$$\partial f_s = (\partial f_a^{f_s} + \partial f_e^{f_s})(1 - f_s) \quad (2.54)$$

En el caso de j micro constituyentes creciendo simultáneamente, la **Ecuación 2.55** puede reescribirse como.

$$\partial f_s = (\sum_j \partial f_j)(1 - f_s) \quad (2.55)$$

Resolviendo analíticamente en la **Ecuación 2.56** se obtiene

$$\ln(1 - f_s) = - \sum_j f_j^{ex} \quad (2.56)$$

La **Ecuación 2.57** puede expresarse, en el caso del crecimiento simultáneo de los microconstituyentes primario y eutéctico de la siguiente manera:

$$\ln(1 - f_s) = - \left[\frac{4}{3} \pi N_a R_s^3 + \frac{4}{3} \pi N_e R_e^3 \right] \quad (2.57)$$

De tal manera que la fracción sólida instantánea durante esta etapa, tomando en cuenta a la interacción entre granos es:

$$f_s = 1 - \exp[-f_{s,a}^{ex} - f_{s,e}^{ex}] \quad (2.58)$$

El incremento de la fracción sólida, Δf_s , durante esta etapa puede describirse como una suma de 2 contribuciones:

$$\Delta f_s = \Delta f_{s,a} + \Delta f_{s,e} \quad (2.59)$$

Cada una de las contribuciones puede ser calculada con base en el incremento de la fracción sólida extendidas correspondiente empleando las **Ecuaciones 2.58** y **2.59**, las cuales se desprenden de la **Ecuación 2.53**:

$$\Delta f_{s,a} = \Delta f_{s,a}^{ex} \exp(-f_{s,e}^{ex} - f_{s,a}^{ex}) \quad (2.60)$$

$$\Delta f_{s,e} = \Delta f_{s,e}^{ex} \exp(-f_{s,e}^{ex} - f_{s,a}^{ex}) \quad (2.61)$$

Para las aleaciones hipoeutécticas Al-Cu la densidad de granos es la determinada mediante metalografía cuantitativa para las condiciones de enfriamiento presentes experimentalmente. En el caso de los microconstituyentes eutécticos, para calcular la densidad de granos eutécticos, N_e ésta se calcula con las ecuaciones de densidad de núcleos en función de la velocidad de enfriamiento obtenidas de la información experimental de densidad de granos obtenida por métodos metalográficos para las tres velocidades de enfriamiento empleadas en las muestras de aleación eutéctica Al-Cu.

La etapa III termina en el momento en que se alcanza el máximo subenfriamiento eutéctico, luego de lo cual inicia la etapa IV, en donde el crecimiento en fracción sólida es debido únicamente al crecimiento de los granos eutécticos.

Etapa IV., El incremento en la fracción sólida se debe al crecimiento del microconstituyente eutéctico, hasta que se agota el líquido remanente (que se supone se alcanza cuando $f_s = 0.999$), momento en el cual termina la solidificación e inicia el enfriamiento del sólido.

Durante esta etapa, el incremento en fracción sólida es calculado empleando la **Ecuación 2.62**, y sumando a la fracción sólida preexistente este incremento en fracción sólida eutéctica Δf_{se} :

$$\Delta f_{se} = \Delta f_{se}^{ex} \exp(-f_{s,e}^{ex} - f_{s,a}^{ex}) \quad (2.62)$$

Etapa V. Esta etapa ocurre posterior al proceso de solidificación, corresponde a los tiempos posteriores al fin de solidificación, t_{fin} y en esta etapa se realiza el enfriamiento de la aleación sólida.

Las propiedades termofísicas empleadas para la simulación de todas las aleaciones eutécticas e hipoeutécticas estudiadas en este trabajo se presenta en la **Tabla 2.3**. Para el crecimiento de los granos equiaxiales se considera la **Ecuación 2.1**, donde μ y n corresponden a los coeficientes cinéticos pre-exponencial y exponencial de crecimiento de granos equiaxiales determinados por el método propuesto y por los datos adicionales reportados en la literatura o generados por el modelo LGK o JH.

Con el propósito de comparar, en las condiciones experimentales presentes en este trabajo y con los mismos criterios de validación que los aplicados para los métodos propuestos, se recabaron los valores de los coeficientes de crecimiento de grano reportados en la literatura para las aleaciones eutécticas bajo estudio.

A continuación se presentan los diagramas de fase de las aleaciones estudiadas en este trabajo. La **Figura 2.20** muestra el diagrama de las aleaciones binarias aluminio-silicio mostrando la composición eutéctica en 12.6 % en peso de silicio a esta composición la temperatura de transformación es 577°C.

El caso de la **Figura 2.21** corresponde a la aleación aluminio-cobre, aquí se tiene una composición con 33% en peso de cobre correspondiente a la composición eutéctica encontrando una temperatura de transformación de 548°C. Para la línea solidus de la solución sólida rica en aluminio se consideró la composición de máxima solubilidad a 5.65 % de cobre. La información de este diagrama junto con el modelo de soluto equivalente y la composición química de las aleaciones hipoeutécticas determinada por espectrometría de emisión por chispa se utilizó para la simulación de las aleaciones hipoeutécticas con 3, 4 y 5% de cobre, empleando un contenido de soluto equivalente que proporcione un valor de la temperatura de liquidus igual al promedio medido experimentalmente para cada contenido de cobre, a fin de comparar más adecuadamente las curvas de enfriamiento experimental con las simuladas por el modelo.

El diagrama de fases binario de aluminio y níquel se presenta en la **Figura 2.22**. Mostrando una composición eutéctica con 5.7% de níquel a una temperatura de transformación e 639.9°C.

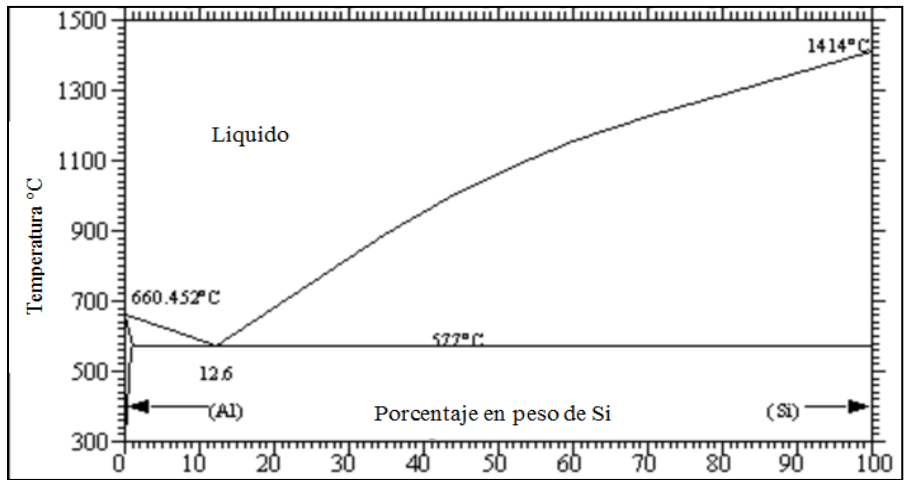


Figura 2.20 Diagrama temperatura contra composición de Al-Si [121].

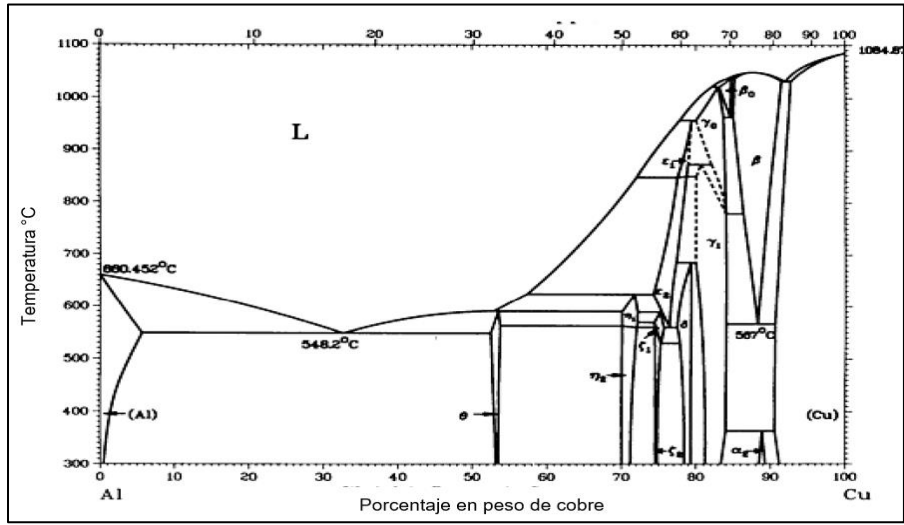


Figura 2.21 Diagrama temperatura contra composición de Al-Cu. [121].

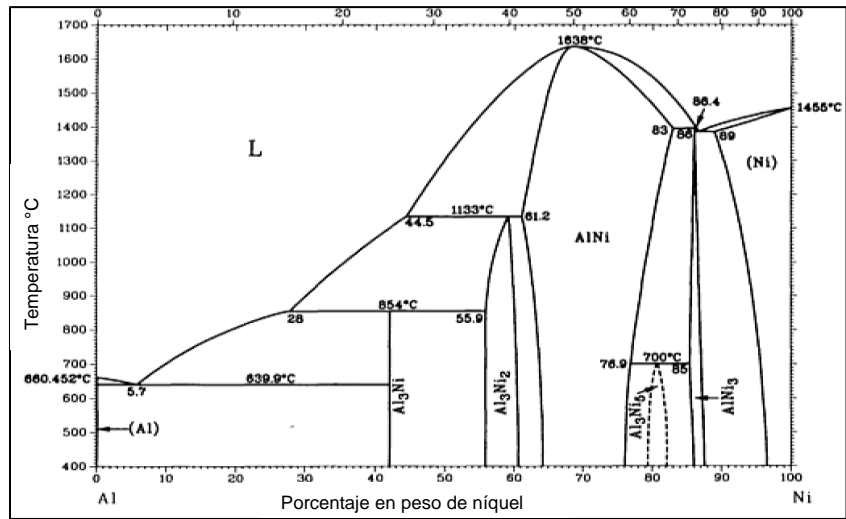


Figura 2.22 Diagrama temperatura contra composición de Al-Ni. [121].

Tabla 2.3 Datos utilizados para el micro macro modelo que simula el enfriamiento y solidificación de las aleaciones eutécticas e hipoeutécticas Al-Cu [122], Al-Ni [123] y Al-Si. [124, 125].

Propiedad		Unidades	Al-Si 12.6%	Al-Cu 33%	Al-Ni 5.7%	Al-Cu 3%	Al-Cu 4%	Al-Cu 5%
Temperatura de colada	T_m	°C	700	700	700	700	700	700
Temperatura eutéctica	T_E	°C	577	548	640	548	548	548
Temperatura ambiente	T_∞	°C	25	25	25	25	25	25
Conductividad de sólido	k_s	Wm ⁻¹ °C ⁻¹	122.26	122.26	267.92	227.31	229.07	230.84
Conductividad del líquido	k_l	W m ⁻¹ °C ⁻¹	77.36	77.36	228.66	99.26	101.68	104.10
Densidad de sólido	ρ_s	Kg m ⁻³	2550	2550	3355.38	2751.86	2811.48	2871.09
Densidad de líquido	ρ_l	Kg m ⁻³	2380	2380	3053.40	2562.01	2622.68	2683.36
Capacidad calorífica de sólido	Cp_s	JKg ⁻¹ °C ⁻¹	907.83	907.83	1140.7	1068.59	1062.79	1056.99
Capacidad calorífica de líquido	Cp_l	JKg ⁻¹ °C ⁻¹	989.83	989.83	1034.32	1101.09	1093.56	1086.02
Entalpia de solidificación	ΔH	J Kg ⁻¹	381851	290000	391357	390300	388400	386500
Coefficiente de difusividad	D_L	m ² s ⁻¹	4.3x10 ⁻⁹	3.5x10 ⁻⁹	6.24x10 ⁻⁹	3.5x10 ⁻⁹	3.5x10 ⁻⁹	3.5x10 ⁻⁹
Coefficiente Gibbs-Thomson	Γ	mK	1.7x10 ⁻⁷	2.41x10 ⁻⁷	4.20x10 ⁻⁷	2.41x10 ⁻⁷	2.41x10 ⁻⁷	2.41x10 ⁻⁷
Φ			3.1	1	2.7	1	1	1
Nodos		i	100	100	100	100	100	100

2.4.3 Aplicación del modelo LGK multicomponente.

Con el fin de validar el modelo propuesto de crecimiento equiaxial dendrítico se implementó en un programa de cómputo el modelo LGK multicomponente [39], la cual fue aplicada a fin de obtener la ecuación que relacione el subenfriamiento del líquido remanente con la velocidad de avance de la punta de dendrítica. Este procedimiento tiene como fin de generar los parámetros de crecimiento de grano asociados con las tres aleaciones hipoeutécticas Al-Cu bajo estudio.

Partiendo de la propuesta de Zou [103] sobre la extensión del modelo LGK, considerando que el subenfriamiento total este asociado a la difusión de cada elemento aleante conforme los solutos son rechazados por la punta dendrítica, expresado por la ecuación:

$$\Delta T = \Delta T_t + \sum \Delta T_{C,i} + \Delta T_r \quad (2.63)$$

Que puede ser expandida a:

$$\Delta T = \frac{\Delta H_f}{Cp} I_v(P_t) + \sum \left[m_{l,i} C_{0,i} \left\{ 1 - \frac{1}{1 - (1 - k_{o,i}) I_v(P_c)} \right\} \right] + \frac{2\Gamma}{R} \quad (2.64)$$

El radio de la punta de la dendrítica, caso multicomponente, es calculado empleando:

$$R_s = \frac{\Gamma/\sigma^*}{\frac{P_t \Delta H_f}{Cp} - \sum \left[\frac{P_t m_i C_{0,i} (1-k_{0,i})}{1-(1-k_{0,i})^{1/P_c}} \right]} \quad (2.65)$$

Es necesario resolver de manera simultánea en las **Ecuaciones 2.64** y **2.65** empleando los valores de composición inicial asociados a la composición química de la relación de interés, así como los coeficientes de distribución de soluto y las pendientes de líquidos resumidos en la **tabla 2.2**.

Para un subenfriamiento total dado, definido por la **Ecuación 2.64**, se calcula el número de Péclet solutal, P_c , que satisface a dichas ecuaciones, se introduce la solución numérica de la **Ecuación 2.57**, para conocer el valor del radio de la punta dendrítica y se aplica la definición de P_c , para obtener la velocidad de avance de la punta dendrítica, V_d .

$$P_c = \frac{VR_s}{2D} \quad (2.66)$$

Para resolver este sistema de ecuaciones, para un valor específico de ΔT , se utilizó un procedimiento en dos pasos: i) para un valor dado de ΔT , se establece un intervalo de valores de P_c , que satisfacen el sistema de **Ecuaciones 2.36** y **2.37** empleando el método de bisección [126]; ii) partiendo del intervalo de valores calculado en el paso anterior, se aplica el método de regla falsi [126], hasta encontrar la raíz, realizando este cálculo para diferentes valores de su enfriamiento se genera un archivo de datos que correlaciona a los valores V en función de ΔT y esta información es procesada para encontrar mediante regresión numérica, una ecuación que describe adecuadamente dicha dependencia.

Como ejemplo de aplicación, en la **Figura 2.23** se presenta la información generada por un programa de cómputo que fue elaborado para obtener los archivos de datos anteriormente mencionados, para el caso de aleación hipo eutéctica base aluminio cuya composición química es mostrada en la **tabla 2.4**.

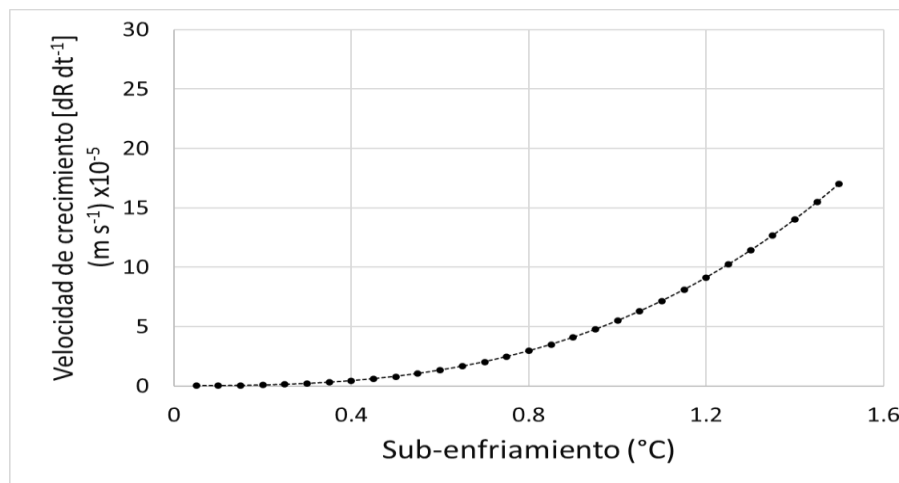


Figura 2.23 Velocidad de avance de la punta dendrítica, V , en función del subenfriamiento, Al-Cu hipoeutéctica con la composición de la tabla 2.4.

Tabla 2.4 Ejemplo de composición química de la aleación, base Al-Cu considerada para la obtención de los resultados mostrados en el a Figura 2.23

%Si	%Mg	%Fe	%Cu	%Al
0.048	0.202	0.407	3.01	resto

Los datos mostrados en la **Figura 2.23** son representados por la **Ecuación 2.67**, con un coeficiente de correlación $r^2 = 0.99$:

$$V = 5.475 \times 10^{-5} (\Delta T)^{2.79} \quad (2.67)$$

Aplicando el mismo procedimiento, pueden obtenerse expresiones similares para aleaciones hipotéticas base Al-Cu de composición química diferente. En el **Anexo IX** se muestra el programa de cómputo asociado.

2.5 Desarrollo de método inverso para obtener datos de coeficiente combinado de transporte de calor.

Para simular el enfriamiento y la solidificación de las aleaciones bajo estudio en un molde metálico se utiliza un modelado inverso a fin de obtener un coeficiente global de transferencia de calor que incluya las aportaciones de las resistencias térmicas, comúnmente presente en estos casos, que son la resistencia térmica asociada con el “air gap”, la asociada con la presencia de la pared del molde metálico, las resistencias térmicas asociadas con las capas de pintura refractaria en las paredes interna y externa del molde metálico y la resistencia térmica vinculada con la transferencia de calor por convección y radiación de la superficie externa del molde (Q_{ex}) representadas en términos de una resistencia térmica global (R_{glob}), y de la diferencia entre la temperatura superficial de la muestra y la temperatura de los alrededores:

$$Q_{ext} = \frac{(T_s - T_\infty)}{R_{glob}} \quad (2.68)$$

El modelo inverso parte de buscar la concordancia entre una curva calculada por el modelo y otra curva experimental correspondiente a una ubicación conocida dentro del sistema, que genere la curva de enfriamiento antes del inicio de la solidificación, a través del ajuste iterativo del valor del coeficiente, el cual es corregido mediante la **Ecuación 2.61** hasta que se cumple un criterio de convergencia:

$$h_\infty(nueva) = h_\infty(anterior) \pm \Delta h_\infty \quad (2.69)$$

Para tal efecto se definió un parámetro equivalente al error porcentual relativo comúnmente empleado para la aplicación de métodos numéricos convencionales en donde se buscó que la temperatura simulada por el modelo (T_{calc}), tuviese una diferencia mínima con la temperatura experimental (T_{exp}), lo que se evaluó mediante la relación:

$$F_{temp} = \frac{|T_{calc} - T_{exp}|}{T_{exp}} * 100 \quad (2.70)$$

El criterio de convergencia empleado consistió en exigir al cálculo que se alcanzaran errores porcentuales relativos inferiores al 0.1%: $F_{temp} < 0.1\%$.

El ajuste de temperatura mediante la corrección del coeficiente se realizó en cada paso de tiempo, siguiendo el siguiente algoritmo de cálculo mostrado en la **Figura 2.24**.

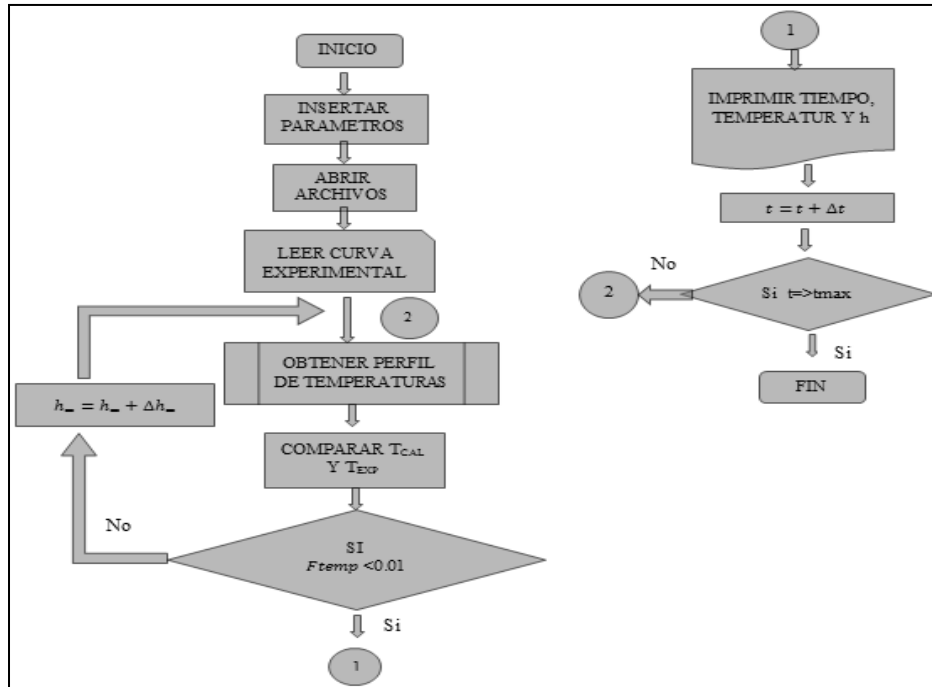


Figura 2.24 Algoritmo de cálculo para la aplicación del modelo inverso de obtención del coeficiente global de transporte.

Para validar el método inverso se partió de una curva de enfriamiento simulada con valores conocidos de h_{∞} a partir de un procesamiento burdo de la curva de enfriamiento experimental. Se simula una nueva curva de enfriamiento empleando el programa implícito con h_{∞} en función de la temperatura.

Esa curva se utiliza como si fuera una curva experimental y se procesa con el programa para aplicar el método inverso a fin de obtener a h_{∞} como una función de la temperatura o el tiempo. La curva obtenida del modelado inverso se compara con curva de enfriamiento experimental durante el enfriamiento del líquido y en función de si esta desplazada hacia adelante o hacia atrás en el tiempo, el valor supuesto de h se ajusta aumentándolo o disminuyéndolo según sea el caso y se vuelve a iterar en la comparación y ajuste de h hasta que se dé la convergencia, usando el algoritmo planteado para determinar el coeficiente de transporte convectivo.

La fuente es el archivo obtenido del programa detallado en el **Anexo X**, en la **Figura 2.24** se muestra el coeficiente de transporte convectivo en función de la temperatura que está definido con la ecuación:

$$h_{\infty} = 85.67316752 + \left(0.659475910 * \exp\left(\frac{T}{132.868344}\right) \right) \quad (2.71)$$

Esta ecuación fue determinada por trabajos desarrollados por [124] González *et al*, para el caso de la aleación eutéctica de aluminio y cobre sin enfriamiento forzado.

La ecuación que se buscará en este trabajo será:

$$h_{\infty} = A_{\infty} + \left(B_{\infty} \exp\left(\frac{T}{C_{\infty}}\right) \right) \quad (2.72)$$

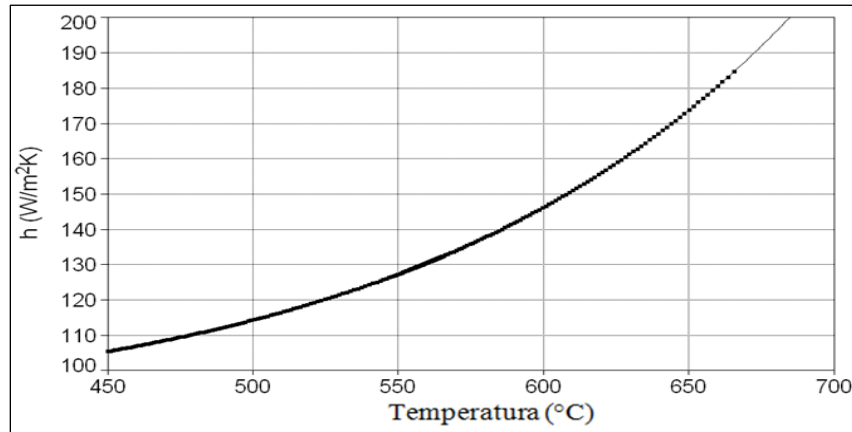


Figura 2.25 Coeficiente convectivo h en función de la temperatura obtenido de un programa previo conocido.

Aplicando el método inverso planteado anteriormente con el programa cuyo código se encuentra en el **Anexo X**, los resultados arrojados por el programa son presentados en la **Figura 2.26**. La información puntual proporcionada por el método inverso es procesada numéricamente para obtener los parámetros de una dependencia exponencial del coeficiente con respecto a la temperatura, **Ecuación 2.72**, se puede constatar un buen acercamiento a los parámetros dados en la ecuación original comparándola con las **Ecuaciones 2.73** y **2.74**, obtenidas del procesamiento de la información térmica de una aleación eutéctica Al-Cu y una hipoeutéctica Al-Cu con 4 % de cobre respectivamente:

$$h_{\infty} = 23.44 + \left(1.90 * \exp\left(\frac{T}{256.41}\right) \right) \quad (2.73)$$

$$h_{\infty} = 23.64 + \left(1.88 * \exp\left(\frac{T}{250.06}\right) \right) \quad (2.74)$$

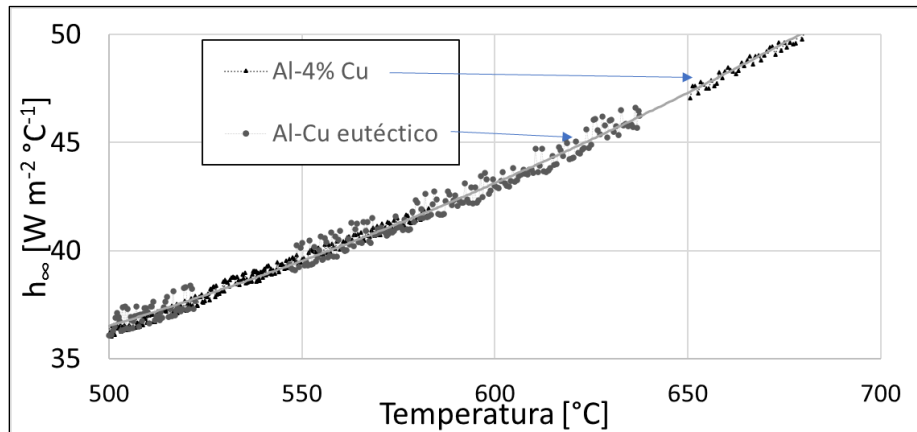


Figura 2.26 Coeficiente convectivo h en función de la temperatura obtenido del programa donde se aplica el método inverso.

En las **Figuras 2.27a** y **2.27b** se muestran las curvas de enfriamiento obtenidas experimentalmente y las simuladas con la aplicación del micro macro modelo con los datos de la cinética de crecimiento y el coeficiente combinado de transporte al inicio de la solidificación y hasta la máxima recalescencia para aleaciones eutécticas Al-Cu y hasta momentos anteriores a la coherencia dendrítica para la aleación hipoeutéctica Al-4%Cu.

En ambas figuras se puede constatar que el acercamiento entre las curvas experimentales y simuladas tiene una diferencia menor a 0.5°C , la evolución térmica es muy cercana, constatando que la efectividad de la aplicación de estos procedimientos es muy alta.

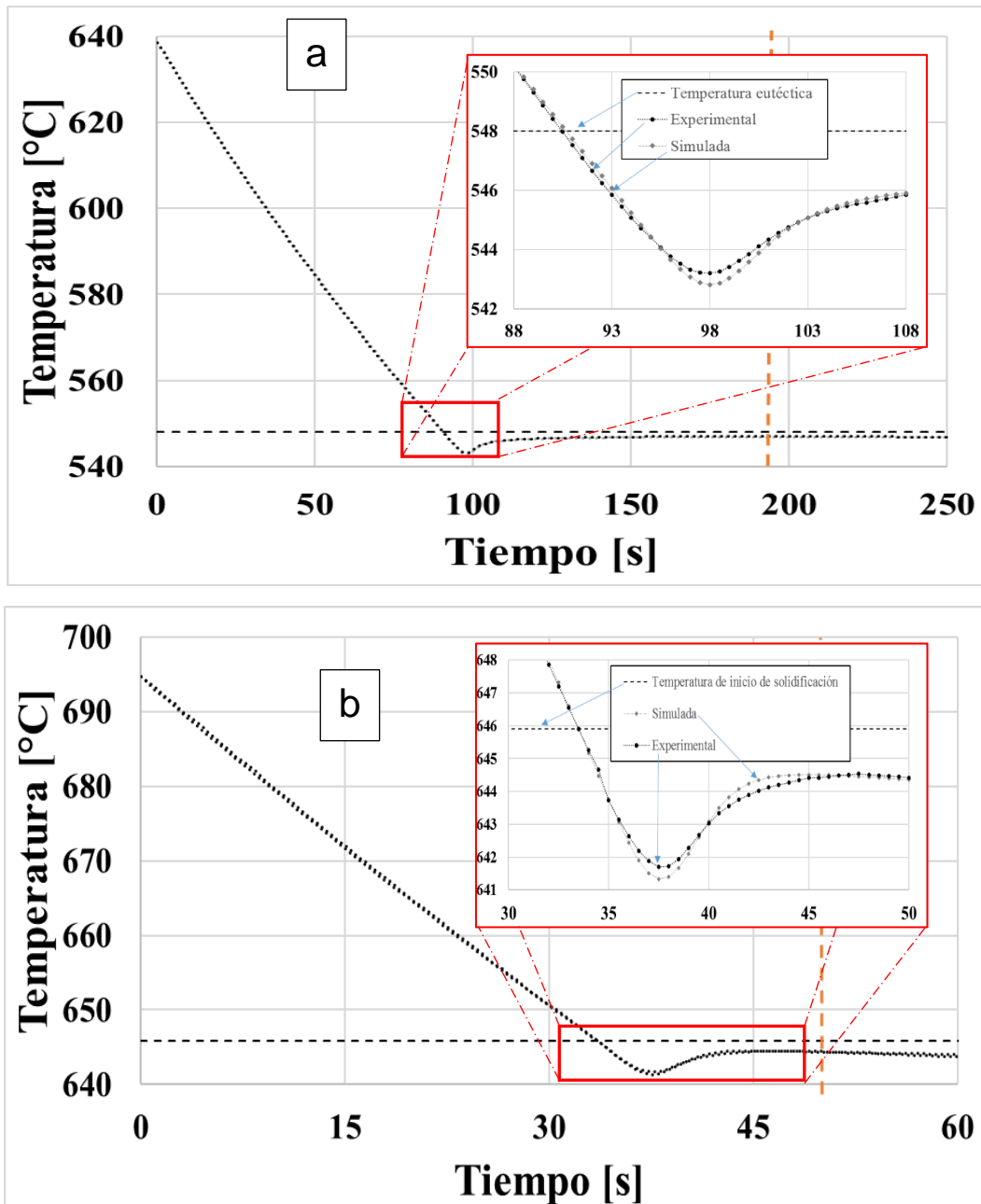


Figura 2.27 Curvas experimentales y simuladas con el modelado inverso, enfriamiento con un flujo de aire 100 L/min , a) aluminio cobre de composición eutéctica, b) aluminio con la estimación de 4% de cobre.

Después de comprobar la efectividad del método inverso para generar ecuaciones del coeficiente global de transferencia de calor en función de la temperatura, se determinó la evolución del coeficiente combinado global de las diferentes curvas de enfriamiento experimental evaluadas en este trabajo. Los resultados se presentan en el **Capítulo 4**.

CAPÍTULO 3 DESARROLLO EXPERIMENTAL

En este trabajo se estudió experimentalmente el efecto de la velocidad de enfriamiento sobre los parámetros de crecimiento de grano para tres aleaciones eutécticas: Al-Si, Al-Cu y Al-Ni.

También se estudió el efecto del contenido de soluto sobre los parámetros de crecimiento de grano para tres aleaciones hipoeutécticas en el sistema Al-Cu: Al-3%Cu, Al-4%Cu y Al-5%Cu.

Para la obtención de los parámetros de crecimiento de grano se utilizó el método propuesto por este trabajo, denominado método de crecimiento libre o FG por sus siglas en inglés, comparándolo con el método de Dioszegi y para las aleaciones eutécticas también con el método de Degand.

Todos estos métodos requieren de datos de la evolución de la fracción sólida y del subenfriamiento. La fracción sólida es obtenida en este trabajo mediante el empleo de los métodos de análisis térmico de Newton y de Fourier. El subenfriamiento es calculado empleando directamente las temperaturas instantáneas registradas en la curva de enfriamiento en un intervalo de tiempo preestablecido. En el caso de aleaciones hipoeutécticas, se requiere también determinar el punto de coherencia dendrítica.

El método de Fourier requiere la obtención de dos curvas de enfriamiento correspondientes a dos termopares ubicados a dos posiciones radiales diferentes y medidas dentro de una muestra cilíndrica que se enfría de manera radial.

También se necesita conocer la densidad de granos presente dentro de las muestras. Esta determinación se realizó mediante metalografía óptica cuantitativa. Por esta razón se requirió realizar cortes transversales y preparación metalográfica de las muestras incluyendo un macroataque. En este capítulo se describe en detalle cómo se realizaron las determinaciones requeridas.

3.1 Diseño y construcción del arreglo experimental

En vista de los requerimientos impuestos por el método de Fourier, el cual necesita que la muestra presente una forma cilíndrica y esté aislada térmicamente en su tapa y en su base, de tal manera que el calor sea extraído de manera radial, se concibió un arreglo experimental para obtener las curvas de enfriamiento y las probetas metalográficas, requeridas para la determinación de parámetros cinéticos de crecimiento de grano mediante la implementación de los métodos de Fourier y de Newton, así como de los métodos de Degand, Dioszegi y de FG. Para tal efecto se investigó en la literatura el diseño de dispositivos que promueven la transferencia de calor unidireccional en la dirección radial y que midieron la temperatura en dos posiciones diferentes, el propuesto por Bäckerud [127] muestra ser el más cercano a cumplir con lo requerido en este trabajo.

El dispositivo experimental empleado para obtener las curvas de enfriamiento requeridas se presenta en la **Figura 3.1**. El dispositivo consta de una cámara de enfriamiento, que es donde se enfría el molde con la muestra. Debajo de esta cámara se encuentra el sistema de distribución de aire de enfriamiento, constituido por otra cámara donde se encuentran mangueras de alimentación de aire comprimido conectadas a cuatro espreas.

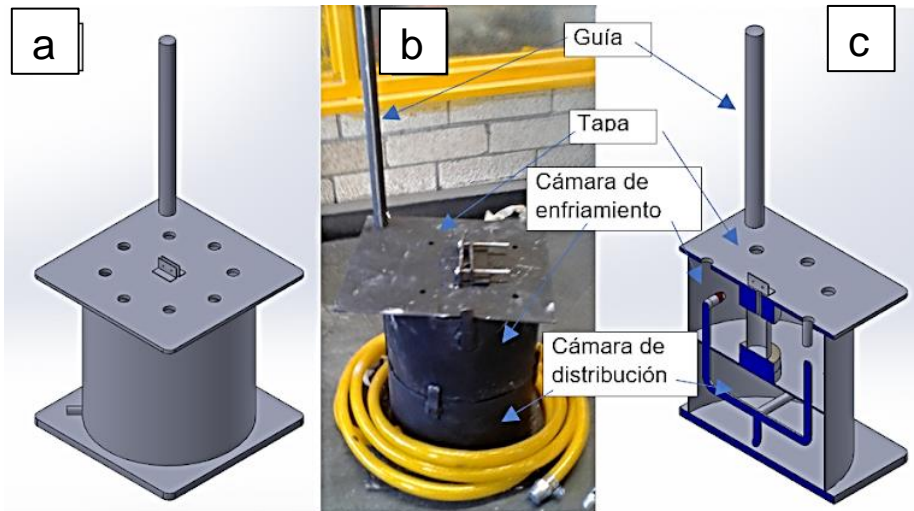


Figura 3.1 a) Esquema del dispositivo, b) Dispositivo antes de emplearse (se agregaron agujeros de salida en la tapa) y c) corte del esquema.

En la **Figura 3.2** se muestra el dispositivo empleado sin la tapa, visualizando un molde en el centro de este y sobre un tabique cerámico, la **Figura 3.2 a** corresponde al diseño y la **Figura 3.2 b** es el dispositivo construido.

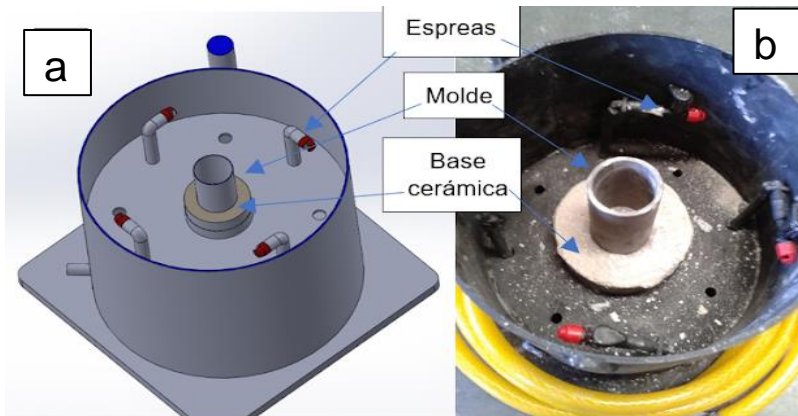


Figura 3.2 a) Esquema de la cámara de enfriamiento del dispositivo, b) Cámara de enfriamiento del dispositivo empleado.

El aire es introducido tangencialmente a las paredes internas de la cámara de enfriamiento a través de espreas. Con este arreglo se buscó controlar la velocidad de enfriamiento de la muestra. En la cámara de enfriamiento existe una base de cerámico refractario, sobre este, se coloca el crisol metálico que contiene a la muestra líquida. La tapa del dispositivo presenta un tabique cilíndrico de cerámico con dos orificios a través de los cuales se introducen dos termopares tipo K con cerámicos bifilares de diámetro exterior de 1.5 mm. Durante un experimento el crisol que contiene la muestra es introducido y colocado en la base cerámica del dispositivo. El crisol es de acero inoxidable y está recubierto con nitruro de boro conteniendo la muestra líquida. Esta muestra se debe tomar con un sobrecalentamiento suficiente para obtener curvas de enfriamiento que permitan identificar claramente la etapa correspondiente al enfriamiento líquido seguido del inicio de la

solidificación. Una vez ubicado el crisol con la muestra en la cámara de enfriamiento, la tapa del dispositivo se baja deslizándola por la barra guía y cuidando que los termopares se ubiquen dentro de la muestra líquida en la posición preestablecida. Una vez cerrado el dispositivo se ingresa el flujo de aire de enfriamiento, el cual es controlado mediante el empleo de un flujómetro y una bomba de aire.

Para verificar su funcionamiento y la presencia de un enfriamiento radial se realizaron pruebas preliminares, obteniendo las curvas de enfriamiento de termopares ubicados a diferentes alturas en el eje de simetría de la muestra.

La **Figura 3.3** muestra tres curvas de enfriamiento obtenidas experimentalmente, para tres muestras diferentes de la aleación Al-Ni con composición eutéctica, enfriadas con un flujo de 100 L min^{-1} . En esta figura se constata que el dispositivo permite obtener buena reproducibilidad para una condición de enfriamiento específica. Durante el enfriamiento de la fase líquida la diferencia entre las muestras es poco distinguible, las mesetas eutécticas son muy similares y las curvas de enfriamiento líquido muestran las mismas pendientes.

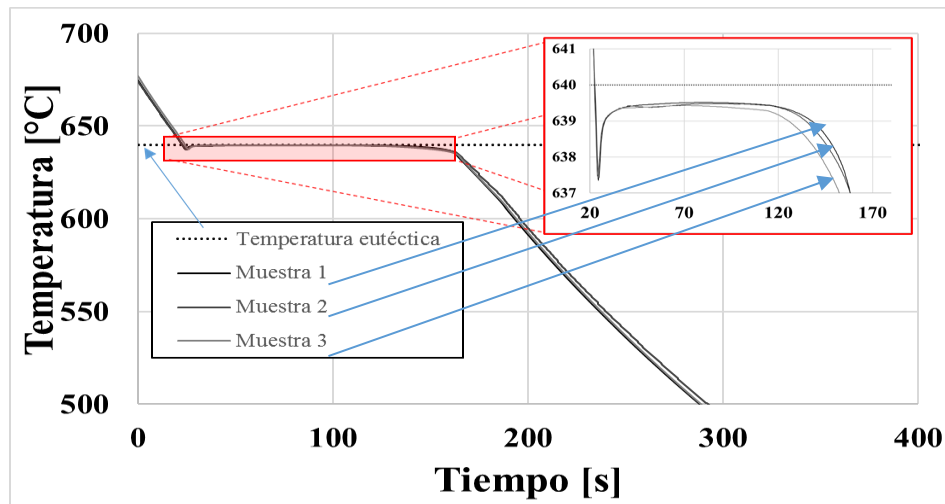


Figura 3.3 Curvas de enfriamiento obtenidas experimentalmente de tres muestras del eutéctico Al-Ni enfriadas a 100 L min^{-1} .

La **Figura 3.4** presenta tres curvas de enfriamiento obtenidas experimentalmente de la aleación eutéctica Al-Ni, para los tres flujos de aire de enfriamiento utilizados, donde se aprecia que la meseta de transformación de fase se acorta a mayores velocidades de enfriamiento, además de aumentar la pendiente de enfriamiento del líquido y del sólido al aumentar la velocidad de enfriamiento.

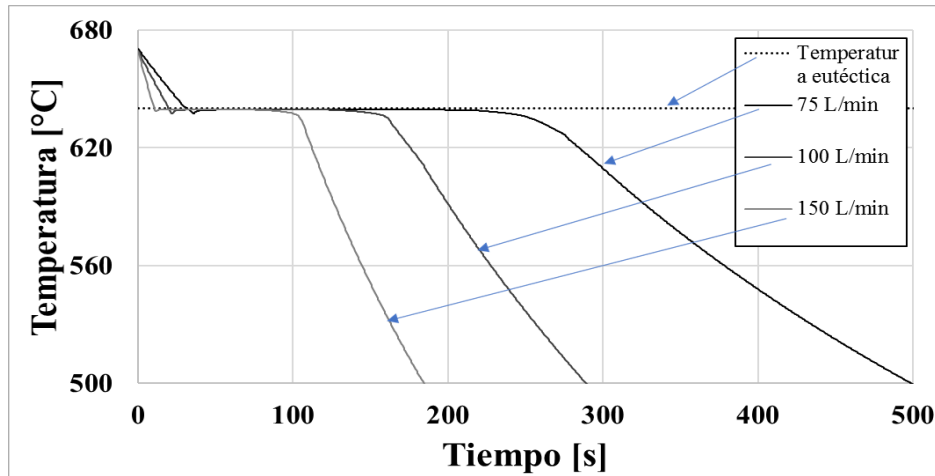


Figura 3.4 Curvas de enfriamiento obtenidas experimentalmente de la aleación eutéctica Al-Ni, enfriadas con 3 flujos de aires diferentes (75, 100, y 150 L min⁻¹).

3.2 Procedimiento experimental.

A continuación, se describe el procedimiento experimental empleado en este trabajo:

Partiendo de aluminio, cobre y níquel de pureza comercial, y con base en un balance de carga inicial se realizó la fusión de las aleaciones en un horno eléctrico de piso.

- 1) A cada aleación se le tomó una muestra para el análisis químico mediante espectrometría de emisión, realizando el balance de carga y ajustando la composición para alcanzar la cantidad requerida.
- 2) Se tomaron los crisoles de acero inoxidable de 3.2 cm de diámetro interno y 5 cm de alto con un espesor de 1 mm, estos fueron recubiertos con pintura de nitruro de boro, precalentados a 100°C por encima de la temperatura de inicio de solidificación o eutéctica de la aleación bajo estudio en un horno mufla de resistencia.
- 3) Los crisoles precalentados se sumergieron en el baño líquido durante 20 segundos para estabilizarlos térmicamente a la misma temperatura de la aleación líquida y obtener la muestra.
- 4) El crisol conteniendo a la muestra bajo estudio se colocó en el dispositivo a manera que uno de los termopares se encontrase en el eje de simetría del cilindro y que los dos termopares entraran dentro de la muestra líquida 2.5 cm, medidas desde la parte superior del crisol.
- 5) Las señales eléctricas de los termopares fueron traducidas a señales digitales mediante el equipo adquirente de National Instruments NI cDaQ9174.
- 6) Las señales digitales de salida del NI cDaQ9174 se interpretaron mediante equipo de cómputo con el Software "Chartview" para obtener los datos con una frecuencia de 2 Hz y guardados en formato "txt".
- 7) Los datos de los archivos de formato txt fueron procesados mediante Visual Studio para obtener los parámetros cinéticos.
- 8) Las muestras son cortadas transversalmente a la mitad. La mitad superior de la muestra es empleada para localizar la posición radial de los termopares, necesaria para evaluar el sistema con el método de Fourier.
- 9) La otra mitad de la muestra es empleada para obtener la densidad de granos mediante técnicas metalográficas.

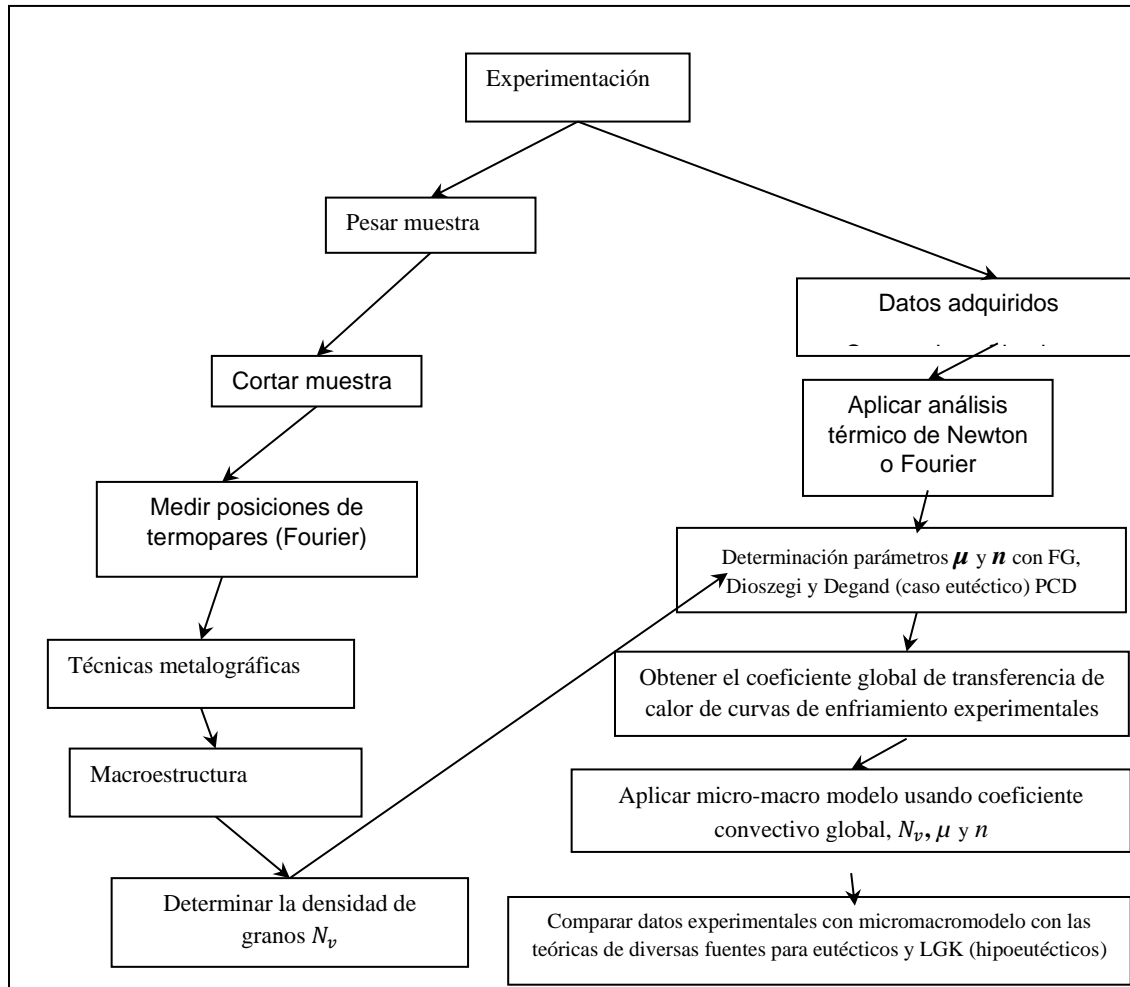


Figura 3.5 Diagrama de procedimiento.

Para el procesamiento de la información experimental obtenida se realizaron las actividades mostradas en el diagrama de bloques de la **Figura 3.5**.

Para aplicar el método de Fourier se requiere conocer la posición de los termopares. La tapa del dispositivo se diseñó para ubicar los termopares en posiciones específicas de 1 mm y 4mm, medición realizada desde el eje de simetría de la muestra, aunque siempre se presentaron ligeras variaciones. Su posición real se verificó mediante el corte transversal de la muestra y medición empleando un vernier.

3.3 Determinación de la densidad de granos.

Para la obtención de la densidad de granos, cada probeta fue cortada transversalmente y preparada metalográficamente de manera convencional hasta pulido a espejo y finalmente fue atacada para obtener la macroestructura empleando los reactivos que se enlistan en la **tabla 3.1**.

Tabla 3.1 Secuencias de ataque utilizados para revelar la macroestructura de las diversas aleaciones.

Aleación	Reactivo	Referencia
Al-Si	Poulton modificado	González <i>et al</i> 2013 [126].
Al-Cu	Keller y limpieza con agua destilada a 60°C	Walker <i>et al</i> 1990 [128]
Al-Ni	CuCl ₂ y posteriormente HF 1%	Walker <i>et al</i> 1990 [128]
Al-Cu 3, 4 y 5%	HCl 0.1M (10 a 30 segundos)	Walker <i>et al</i> 1990 [128]

En la **Figura 3.6** se muestran ejemplos de las macroestructuras presentadas por cada aleación, eutécticas a) Aluminio Silicio, b) Aluminio Cobre, c) Aluminio Níquel, las hipoeutécticas d) Aluminio 3% de Cobre, e) Aluminio 4% de Cobre y f) Aluminio con 5% de Cobre. Las imágenes son filtradas con el máximo contraste y en escala de grises para una mejor visualización de los granos. Las imágenes son filtradas con el máximo contraste y en escala de grises para una mejor visualización de los granos.

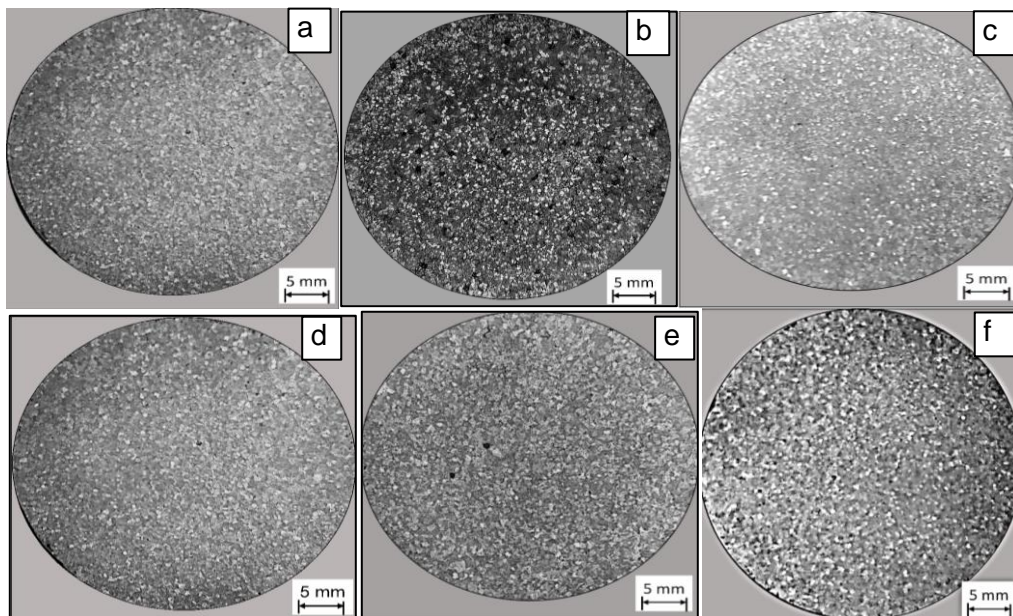


Figura 3.6 Ejemplos de macroestructuras de a) Aluminio silicio eutéctico, b) Aluminio cobre eutéctico, c) Aluminio-níquel eutéctico, d) Aluminio 3% cobre Cu 3, e) Aluminio 4% cobre y f) Aluminio 5% cobre

El procedimiento utilizado para determinar la densidad volumétrica de los granos empleando análisis metalográfico cuantitativo sobre macrografías de las muestras macro tacadas, obtenidas de los diferentes experimentos fue:

- 1) medir el diámetro de la muestra.
- 2) trazar un círculo del mismo tamaño para todas las muestras, el cual define el área de referencia

3) determinar el número de granos en el área de referencia incluyendo su perímetro de acuerdo con el método planimétrico para establecer la densidad de granos por unidad de área N_A

4) calcular la densidad de granos por unidad de volumen mediante la relación estereográfica [129]:

$$N_V = 0.87 * (N_A)^{\frac{3}{2}} \quad (3.1)$$

Donde N_V es la densidad volumétrica de granos y N_A la densidad de granos por unidad de área.

Para realizar estas determinaciones se emplea una cámara digital de 11 Megapíxeles, con la cual se obtuvieron fotografías de las muestras macro atacadas, cuidando de mantener la misma distancia focal en todas las tomas. Todas las fotografías fueron tomadas bajo las mismas condiciones, para proporcionar una referencia para el conteo de granos. Se aplicó el método planimétrico o de Jeffries descrito en la norma ASTM E112 [129].

La **Figura 3.7** muestra un ejemplo del círculo trazado para realizar el conteo de granos sobre la macrografía de una muestra de aleación Al-Cu de composición eutéctica.

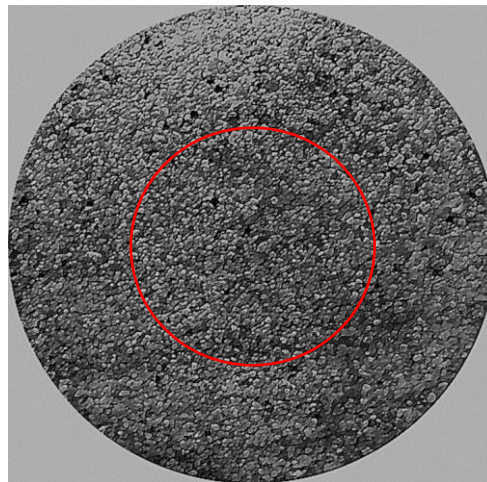


Figura 3.7 Ejemplo de trazado de área de referencia para conteo de granos para la aleación eutéctica Al-Cu.

El procedimiento consta de contar los granos que se ubicaban por completo dentro del círculo de referencia, n_1 y del número de granos que interceptaban el perímetro del área analizada, n_2 , determinando el número total de granos en el área de referencia, N_l , mediante la ecuación:

$$N_l = \left(n_1 + \frac{n_2}{2} \right) \quad (3.2)$$

Para determinar el número de granos por unidad de área, N_A , se aplicó la fórmula [129].

$$N_A = \frac{N_l}{A_{ref}} \quad (3.3)$$

Donde A_{ref} , es el área donde se efectúa la medición.

La **tabla 3.2** muestra los datos medidos del diámetro promedio de los granos, así como la densidad de granos por unidad de área y de volumen.

El conteo de grano se realizó siguiendo el procedimiento arriba descrito, en la **tabla 3.2** se resumen los valores empleados de A_{ref} y los encontrados para N_l , así como los valores correspondientes a N_A y N_V .

Tabla 3.2 Datos del proceso de cálculo para determinar la densidad de grano de la aleación Al-Cu de composición eutéctica, enfriada con diferente flujo de aire.

Flujo de aire [L min ⁻¹]	muestra	A_{ref} [m ²]	N_l [#granos en el área de referencia]	N_A [#granos m ⁻²]	N_V [#granos m ⁻³]	T.G. [μm]
75	1	1.77x10 ⁻⁴	128.43	7.27x10 ⁵	5.39x10 ⁸	779
	2	1.77x10 ⁻⁴	121.01	6.85 x10 ⁵	4.93x10 ⁸	826
	3	1.77x10 ⁻⁴	121.01	6.85 x10 ⁵	4.93x10 ⁸	826
	Promedio			123.45	6.99 x10 ⁵	5.08x10 ⁸
100	1	1.77x10 ⁻⁴	205.37	1.16 x10 ⁶	1.09x10 ⁹	487
	2	1.77x10 ⁻⁴	215.30	1.22 x10 ⁶	1.17x10 ⁹	464
	3	1.77x10 ⁻⁴	225.01	1.27 x10 ⁶	1.25x10 ⁹	444
	Promedio			214.07	1.21 x10 ⁶	1.16x10 ⁹
150	1	1.77x10 ⁻⁴	576.02	3.26 x10 ⁶	5.12x10 ⁹	174
	2	1.77x10 ⁻⁴	658.63	3.73 x10 ⁶	6.26x10 ⁹	152
	3	1.77x10 ⁻⁴	693.25	3.92 x10 ⁶	6.76x10 ⁹	144
	Promedio			645.94	3.66E+06	6.08x10 ⁹

3.4 Determinación de la Fracción sólida mediante la aplicación de los métodos de Newton y de Fourier.

Experimentalmente se obtuvieron las curvas de enfriamiento asociadas a las dos posiciones radiales de los termopares insertados en la muestra inicialmente líquida como se ilustra en las **Figuras 3.8 a** y **3.8 b** para la aleación hipoeutéctica Al-4%Cu y el eutéctico Al-Ni respectivamente.

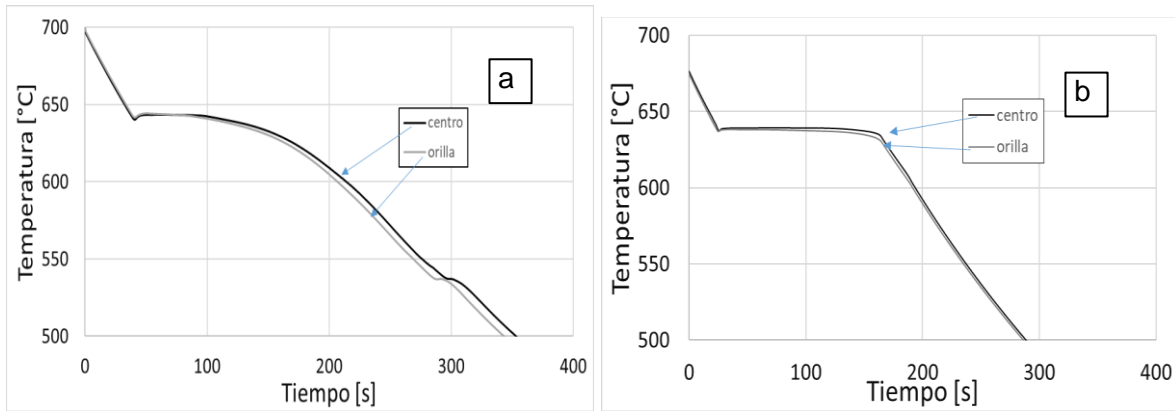


Figura 3.8 Curvas de enfriamiento en el centro y en la orilla de las aleaciones señaladas, (a) aleación aluminio con 4% de cobre y (b) aleación aluminio níquel de composición eutéctica.

Se procedió a calcular la primera derivada de las curvas de enfriamiento asociadas con el termopar ubicado en la posición más cercana al eje de simetría y a determinar los tiempos de inicio y fin de solidificación como se ilustra en las **Figuras 3.9 a** y **3.39 b** para la aleación hipoeutéctica Al-4%Cu y el eutéctico Al-Ni respectivamente.

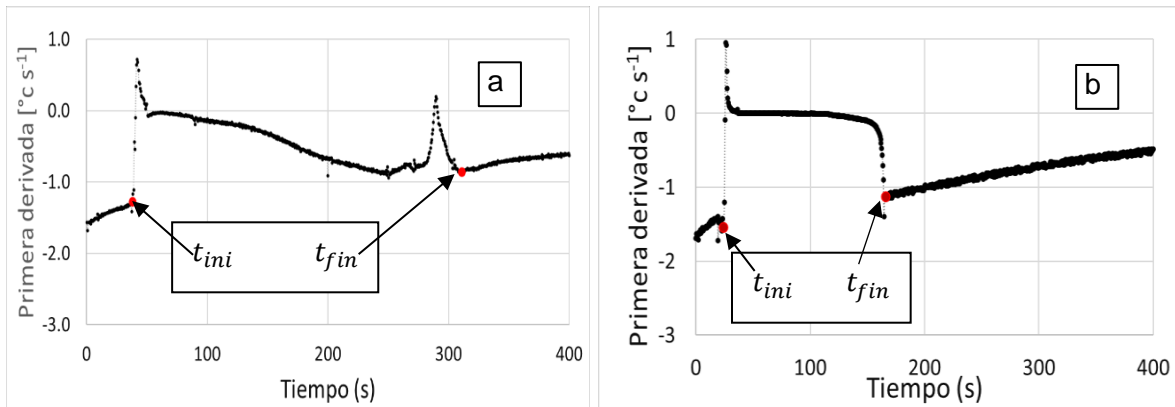


Figura 3.9 Primeras derivadas de las curvas de enfriamiento en el centro junto con los tiempos de inicio de solidificación t_{ini} y de fin de solidificación t_{fin} indicados sobre la figura para las aleaciones señaladas, aleación aluminio con 4% de cobre (a) y aleación aluminio níquel de composición eutéctica (b).

Una vez conocidos los puntos de inicio y fin de solidificación, se procedió a calcular las curvas cero de referencia para cada método empleando los procedimientos descritos en el **Capítulo 2**.

En la **Figura 3.10** se ilustran las primeras derivadas junto con las curvas cero de Newton, **Figura 3.10 a** y de Fourier, **Figura 3.10 b** para la aleación eutéctica Al-Ni, respectivamente. En la **Figura 3.11** se muestra la derivada con las curvas cero de Newton (**Figura 3.11a**) y de Fourier (**Figura 3.11b**) de Al-4%Cu. Siguiendo los procedimientos descritos en el **Capítulo 2**, se integró numéricamente el área entre las dos curvas y se determinó la evolución de la fracción sólida en función del tiempo

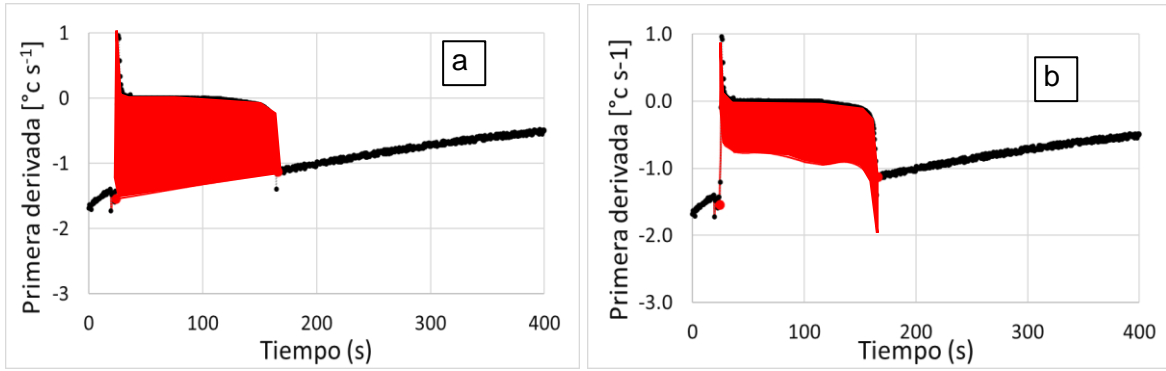


Figura 3.10 a y b Muestra las primeras derivadas de las curvas de enfriamiento en el centro junto con las curvas cero de Newton para la aleación hipoeutéctica y la cero de Fourier para el eutéctico Al-Ni y pintado de rojo el área entre las curvas.

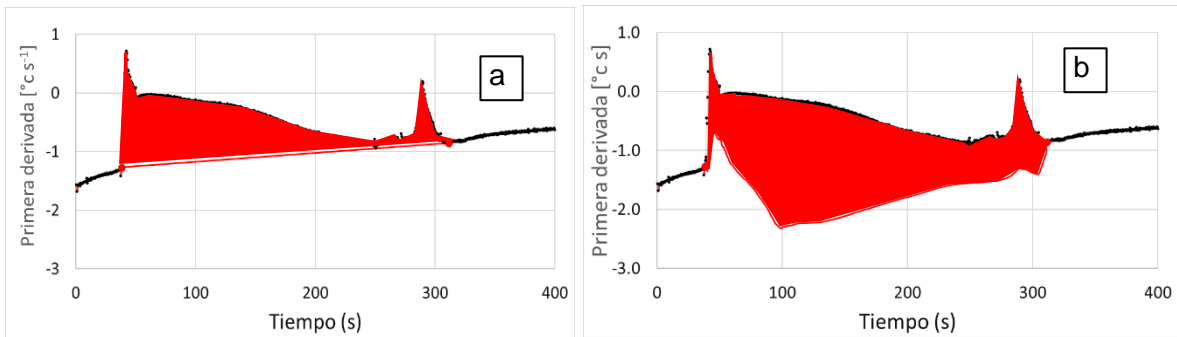


Figura 3.11 Primeras derivadas de las curvas de enfriamiento en el centro junto con las curvas cero de Newton y de Fourier para el eutéctico Al-Cu 4% y pintado de rojo el área entre las curvas de primera derivada y curva cero desde el tiempo de inicio de solidificación.

La fracción sólida está dada por el cociente del área entre curvas medida del inicio de la solidificación hasta el tiempo de evaluación, dividida entre el área total entre curvas. Realizando este proceso se generaron archivos que proporcionan la evolución de la fracción sólida en función de la temperatura, como se ilustra en las gráficas de la **Figura 3.12**.

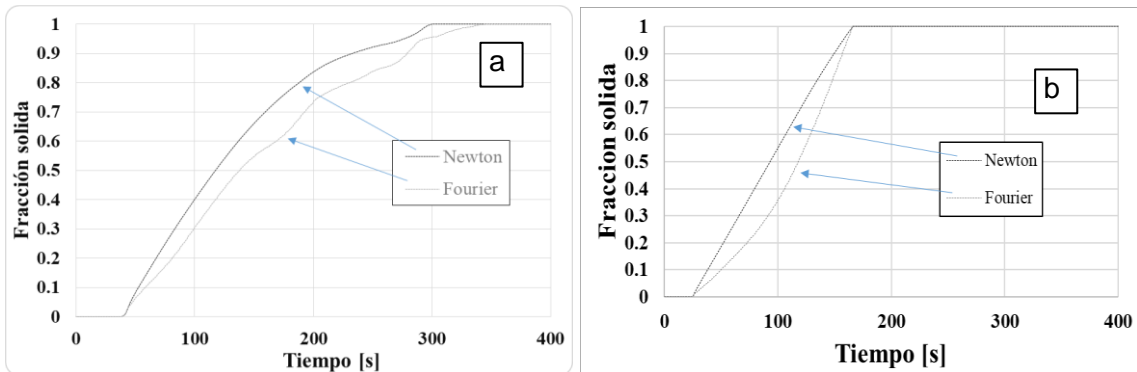


Figura 3.12 Gráficas de evolución de fracción sólida de la aleación hipoeutéctica Al-Cu 4% (a) y para el eutéctico Al-Ni (b).

3.5 Determinación de los parámetros de crecimiento de grano.

Aplicando los procedimientos descritos en el **Capítulo 2**, en el caso más general de la aleación hipoeutéctica se emplearon los datos obtenidos de la curva de enfriamiento, los datos de evolución de fracción sólida y los datos de densidad de granos para aplicar los métodos FG y Dioszegi.

Como primer paso se determinó el punto de coherencia dendrítica aplicando el método de Djurdjevic el cual involucra la generación de la gráfica de la derivada de la curva de enfriamiento con respecto a la temperatura y la identificación de la temperatura a la que se presenta el punto de coherencia dendrítica.

Con base en esta temperatura se identifica en los archivos de evolución con respecto al tiempo de la temperatura y de la fracción sólida, el tiempo y la fracción sólida en el PCD.

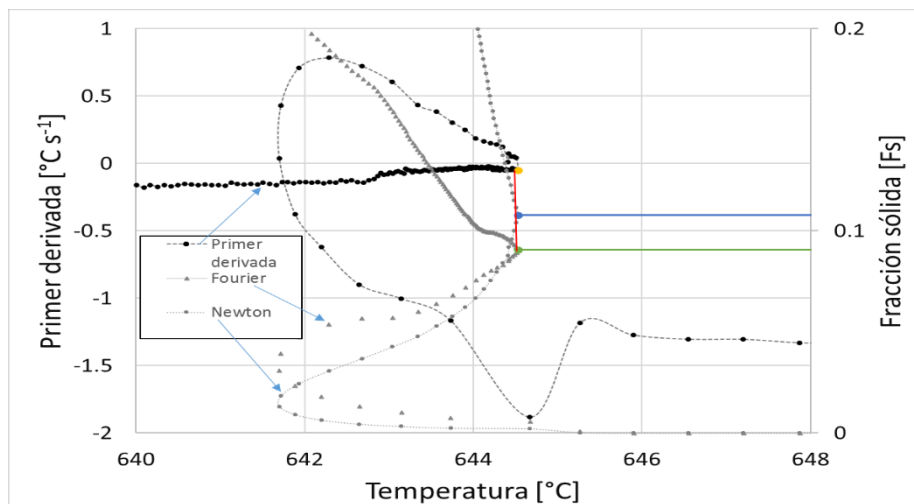


Figura 3.13 Primera derivada y evolución de la fracción sólida de Newton y Fourier respecto a la temperatura de la aleación Al-Cu 4% determinando el PCD.

La **Figura 3.14** muestra la sección de datos de las curvas de enfriamiento que fueron tomados para calcular el subenfriamiento empleado por el análisis de la cinética de crecimiento de grano. La **Figura 3.14 a**, que ejemplifica lo realizado en el caso de las aleaciones hipoeutécticas, corresponde a la curva de enfriamiento de la aleación hipoeutéctica Al-Cu 4%, en donde se observa que el dato inicial de la curva es el que corresponde al tiempo de inicio de la solidificación (t_{ini}) y a la temperatura de inicio de solidificación de la fase primaria, que se muestra en el plano temperatura contra tiempo con una línea punteada. Esta temperatura es empleada para calcular, a partir de ella el subenfriamiento instantáneo que presentan los siguientes puntos de la curva de enfriamiento, hasta que se alcanza la coherencia dendrítica al tiempo t_{PCD} , de acuerdo con el procedimiento descrito en el **Capítulo 2**. La **Figura 3.14 b** que ejemplifica lo realizado en el caso de las aleaciones eutécticas, muestra la zona de la curva de enfriamiento de la aleación Al-Cu eutéctica, y a la temperatura eutéctica correspondiente, que se muestra en el plano temperatura contra tiempo como una línea punteada, temperatura que es empleada para calcular el subenfriamiento usando como primer punto de referencia en la curva de enfriamiento la temperatura en donde se alcanza el máximo subenfriamiento al tiempo (t_{ini}) y los puntos sucesivos de la curva hasta alcanzar la máxima recalcancia, al tiempo (t_{PCD}).

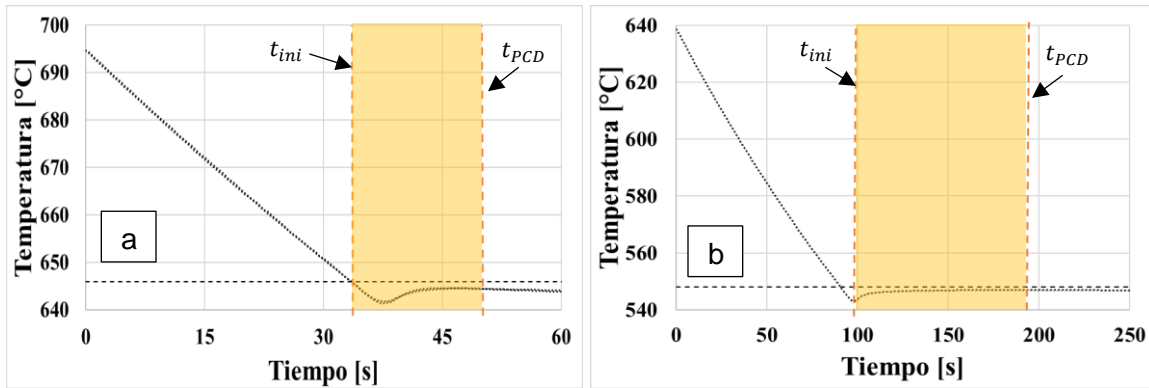


Figura 3.14 Gráficos de las curvas de enfriamiento de la aleación Al-Cu 4% (a) y Al-Cu de composición eutéctica (b), se indica el tiempo rango de datos evaluados.

Para las aleaciones hipoeutécticas y una vez que se tienen identificados el tiempo de inicio y el tiempo al que se presenta la coherencia dendrítica, se procesan numéricamente, en ese intervalo de tiempos, los datos de la curva de enfriamiento y de la fracción sólida, para generar la gráfica de $\text{Log}\left(\frac{dR}{dt}\right)$ vs $\text{Log } \Delta T$ siguiendo los procedimientos descritos en el **Capítulo 2** para los métodos de FG y de Dioszegi (ver **Figura 3.15**).

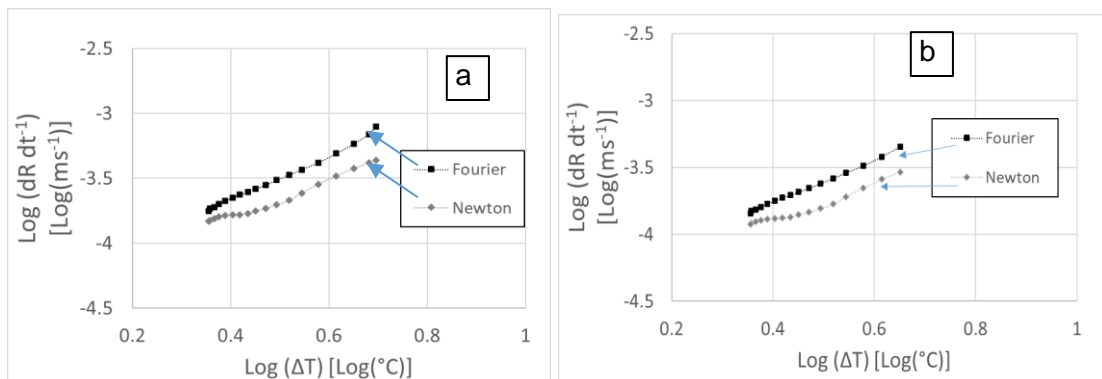


Figura 3.15 Gráficos de las cinéticas Newton y Fourier de la aleación Al-Cu 4%, procesadas con el método de Dioszegi (a) y FG (b).

En el caso de las aleaciones eutécticas, para generar la gráfica de $\text{Log}\left(\frac{dR}{dt}\right)$ vs $\text{Log } \Delta T$, (ver **Figura 3.16**) se emplean los datos de la curva de enfriamiento y de la fracción sólida desde el punto de máximo subenfriamiento hasta el tiempo asociado a la recalentamiento máxima. Para el método de Degand, el radio promedio de grano es el que se obtiene de la muestra experimental metalográficamente, por el método planimétrico.

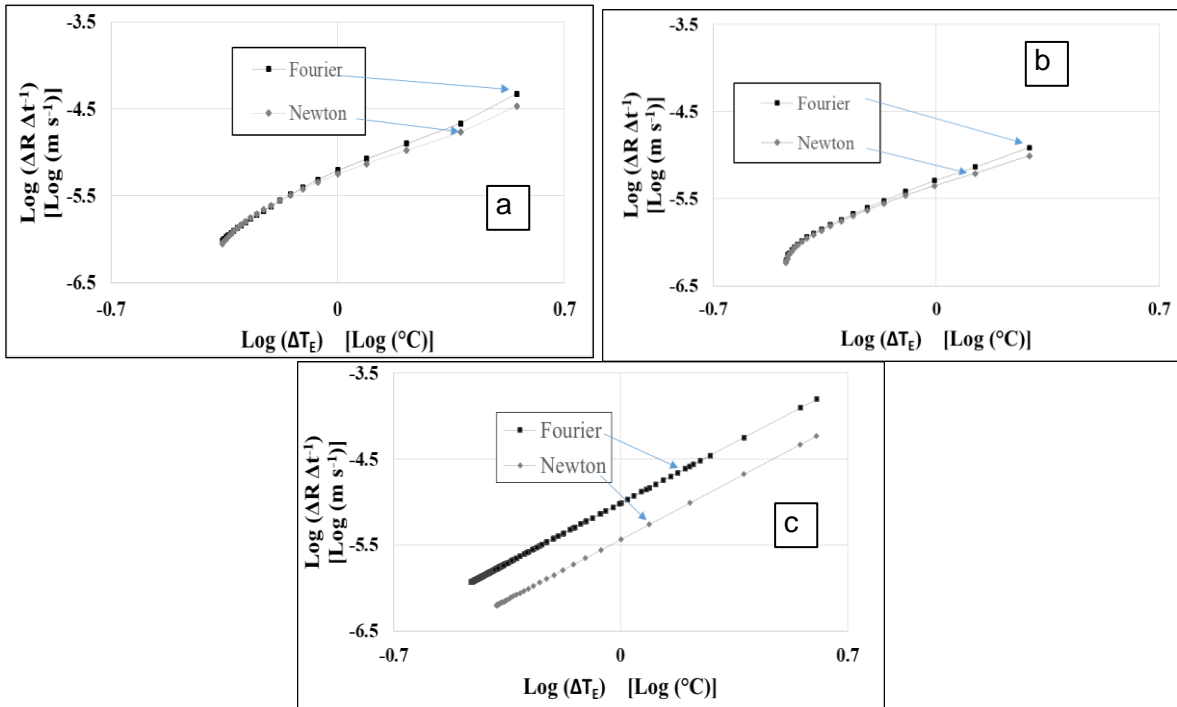


Figura 3.16 Gráficos de resultados de la aplicación de los métodos de crecimiento equiaxial eutéctico de la aleación Al Ni enfriado con 100 Litros por minuto de aire dado por los métodos de Fourier y Newton. a) FG, b) Dioszegi, y c) Degand.

CAPÍTULO 4 RESULTADOS Y ANÁLISIS

En la primera parte de este capítulo se presentan los resultados obtenidos para las aleaciones eutécticas Al-Si, Al-Cu y Al-Ni incluyendo las curvas de enfriamiento, las evoluciones de la fracción sólida, y las densidades de grano determinadas en las tres condiciones de velocidad enfriamiento. Posteriormente se muestra la aplicación de los métodos FG, Dioszegi y Degand para la obtención de los parámetros de crecimiento de grano, la comparación de estos valores con los valores reportados en la literatura bajo las mismas condiciones de enfriamiento, la validación de los mismos mediante el empleo del micromacromodelo y el análisis del efecto de la velocidad de enfriamiento sobre la cinética de crecimiento de grano, la densidad de núcleos, la evolución de la fracción sólida y las características observadas en las curvas de enfriamiento experimentales.

En la segunda parte de este capítulo se presentan los resultados obtenidos para las aleaciones hipoeutécticas Al-3%Cu, Al-4%Cu y Al-5%Cu incluyendo las curvas de enfriamiento, las evoluciones de la fracción sólida, las determinaciones del punto de coherencia dendrítico y las densidades de grano determinadas para los tres contenidos de cobre. Posteriormente se muestra la aplicación de los métodos FG y Dioszegi para la obtención de los parámetros de crecimiento de grano, la comparación de estos valores con los valores generados por el modelo LGK multicomponente y la validación de estos mediante el empleo del micromacromodelo elaborado para tal efecto. Finalmente se presenta el análisis del efecto del contenido de soluto sobre la cinética de crecimiento de grano, la densidad de núcleos, el punto de coherencia dendrítica y las características observadas en las curvas de enfriamiento experimentales.

4.1 Aleaciones eutécticas.

Se realizó la experimentación obteniendo las curvas de enfriamiento y las muestras correspondientes a cada sistema eutéctico a tres velocidades de enfriamiento.

En las **Figuras 4.1 a 4.3** se muestran las curvas de enfriamiento experimentales obtenidas para cada sistema eutéctico, **Figura 4.1** corresponde al sistema eutéctico Al-Si, **Figura 4.2** al sistema eutéctico Al-Cu y **Figura 4.3** al eutéctico Al-Ni.

En estas figuras se observa que las curvas de enfriamiento se forman de tres secciones. La primera abarca desde el inicio de registro de la temperatura hasta la temperatura eutéctica, y corresponde al enfriamiento de la aleación líquida. La segunda sección inicia cuando la temperatura es menor a la eutéctica, continúa con la presencia de la meseta de solidificación del microconstituyente eutéctico, en la cual la temperatura se mantiene relativamente constante y termina cuando la curva vuelve a caer, mostrando nuevamente una pendiente negativa, con una caída en forma casi lineal de la temperatura que corresponde a la tercera sección, de enfriamiento del sólido. Se puede observar que, conforme se incrementa la velocidad de enfriamiento, como resultado de un mayor flujo de aire que impacta a las muestras, las pendientes de la curva de enfriamiento durante los enfriamientos del líquido y del sólido se vuelven más negativas y se presenta un acortamiento de la meseta eutéctica, lo que indica que el tiempo de solidificación se acorta.

4.1.1 Curvas de enfriamiento de aleaciones eutécticas.

En la **Figura 4.1-b** se muestra un acercamiento de la **Figura 4.1 a**, que corresponden a las curvas de enfriamiento de la aleación Al-Si con 3 velocidades de enfriamiento, donde se puede notar la variación en la temperatura de máxima recaescencia que resulta al cambiar la velocidad de enfriamiento. Se observa que la posición de este máximo depende de la velocidad de enfriamiento, conforme sea menor la velocidad de enfriamiento, la temperatura de máxima recaescencia es menor, también se observa que la amplitud del subenfriamiento es mayor al disminuir la velocidad de enfriamiento. Estos efectos pueden deberse al hecho de que, como se verá más adelante, al aumentar la velocidad de enfriamiento, se incrementa el número de núcleos activados durante la solidificación, lo cual provoca a su vez que aumente la liberación de calor latente, lo que impide el aumento del subenfriamiento del sistema, traduciéndose en una reducción del subenfriamiento máximo y un incremento en la temperatura de máxima recaescencia.

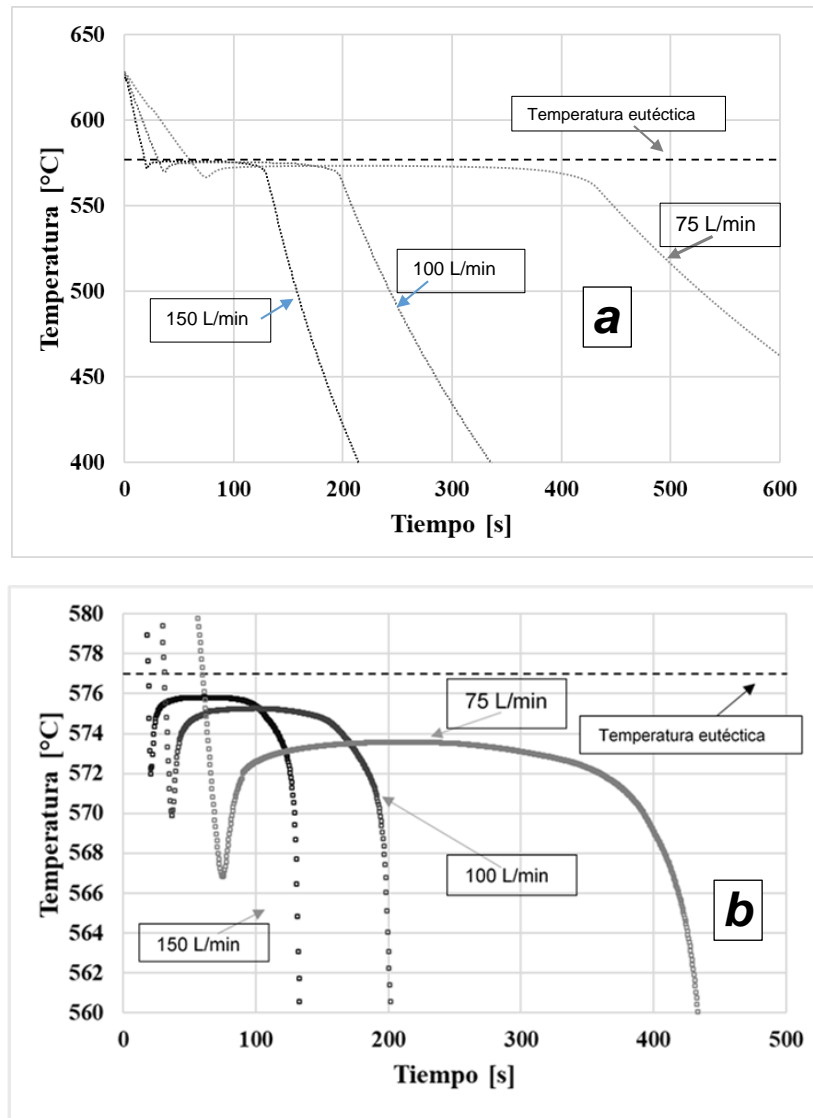


Figura 4.1 Curvas de enfriamiento de la aleación Al-Si con diferente flujo de aire de ingreso al dispositivo. (a) Curva con límite en la isoterma 400°C y 600 s, (b) acercamiento de (a).

La **Figura 4.2** muestra las curvas de enfriamiento de la aleación de composición eutéctica Al-Cu con las mismas condiciones de enfriamiento a las que se sometió la aleación Al-Si. Estas muestran un comportamiento similar en las tres regiones de enfriamiento y solidificación, además de las condiciones de aumento de su velocidad de enfriamiento y reducción de la temperatura de máxima recalescencia al disminuir la velocidad de enfriamiento.

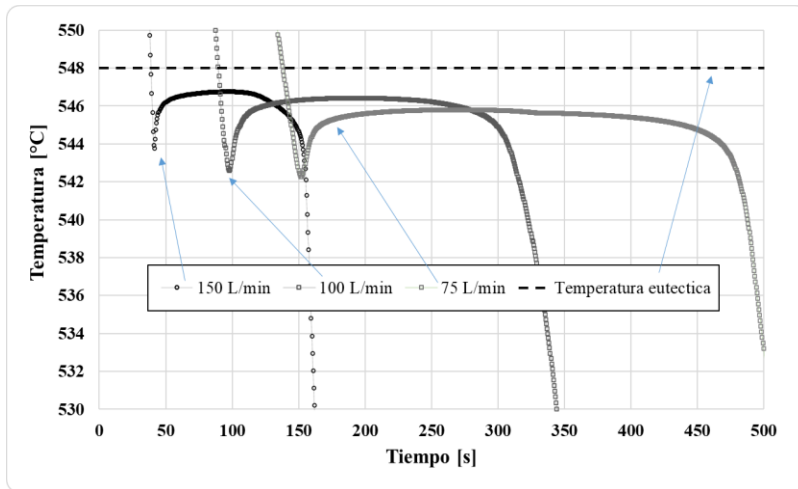


Figura 4.2 Curvas de enfriamiento de la aleación Al- Cu con diferente flujo de aire de ingreso al dispositivo.

En la **Figura 4.3** se muestran las curvas de enfriamiento obtenidas experimentalmente con los distintos flujos de aire de la aleación eutéctica Al-Ni mostrando el mismo comportamiento al presentado por los eutécticos Al-Si y Al-Cu.

En los tres casos con diferente componente de aleación se presentan relaciones fenomenológicas similares, esto puede deberse al comportamiento de la velocidad de crecimiento de grano y de la densidad de granos bajo diferentes condiciones de enfriamiento, como lo revelan los resultados que se muestran más adelante.

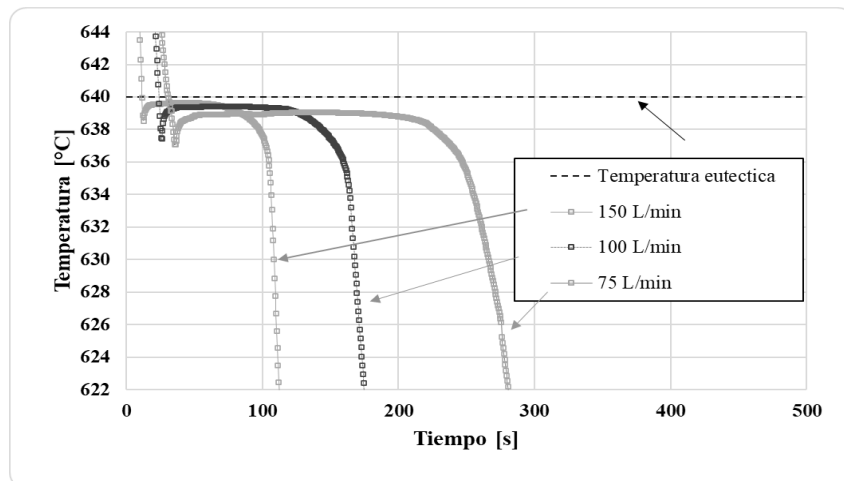


Figura 4.3 Curvas de enfriamiento de la aleación Al- Ni con diferente flujo de aire de ingreso al dispositivo.

4.1.2 Evolución de la fracción sólida de aleaciones eutécticas

Para todos los casos se procedió a aplicar los métodos de Newton y Fourier con el propósito de obtener la evolución de las fracciones sólidas en función del tiempo. La **Figura 4.4** muestra los resultados típicos de evolución de fracción sólida aplicando los métodos de Newton (a) y Fourier (b) en el caso de especímenes del eutéctico Al-Cu. En ambas figuras es notorio que, derivado del aumento de flujo de aire usado para el enfriamiento de las muestras surge un aumento en la pendiente de la evolución de la fracción sólida. También se presenta una reducción en el tiempo de inicio de solidificación y la diferencia entre el inicio y fin de la solidificación se reduce. Lo anterior sugiere que un incremento en la velocidad de enfriamiento aumenta la velocidad de formación de sólido lo cual reduce la diferencia entre el tiempo de inicio y de fin de la solidificación. Comparando el resultado entre la evolución obtenida por el método de Newton y Fourier se observa que al inicio y fin de solidificación la evolución de Fourier muestra pendientes menores, lo cual afecta al cálculo cinético, como se observará más adelante.

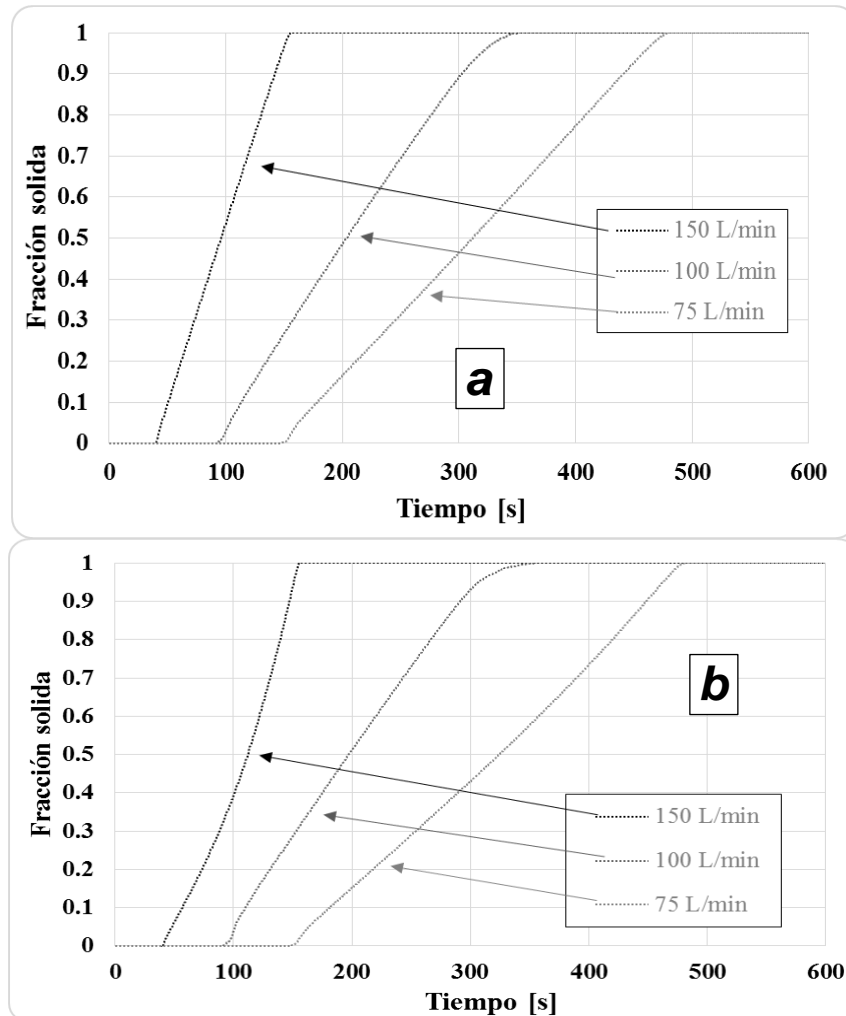


Figura 4.4 Fracción sólida en función del tiempo obtenida de la aplicación de método de Newton (a) y Fourier (b) a las curvas de enfriamiento obtenidas a diferente flujo de aire, para la aleación Al-Cu.

4.1.3 Macroestructuras y densidad de grano de aleaciones eutécticas

Se aplicaron los procedimientos metalográficos presentados en el **Capítulo 3** con el propósito de revelar la macroestructura de las muestras experimentales y de determinar la densidad de granos por unidad de volumen a partir del número de granos por unidad de superficie. En la **Figura 4.5** se presenta un ejemplo de las macroestructuras obtenidas para la aleación Al-Cu bajo las tres condiciones de enfriamiento, en donde se puede ver que conforme se incrementa la velocidad de enfriamiento, aumenta el número de granos y se reduce, en consecuencia su tamaño. Las macroestructuras obtenidas para las muestras de los tres eutécticos se incluyen en el **Anexo IV**.

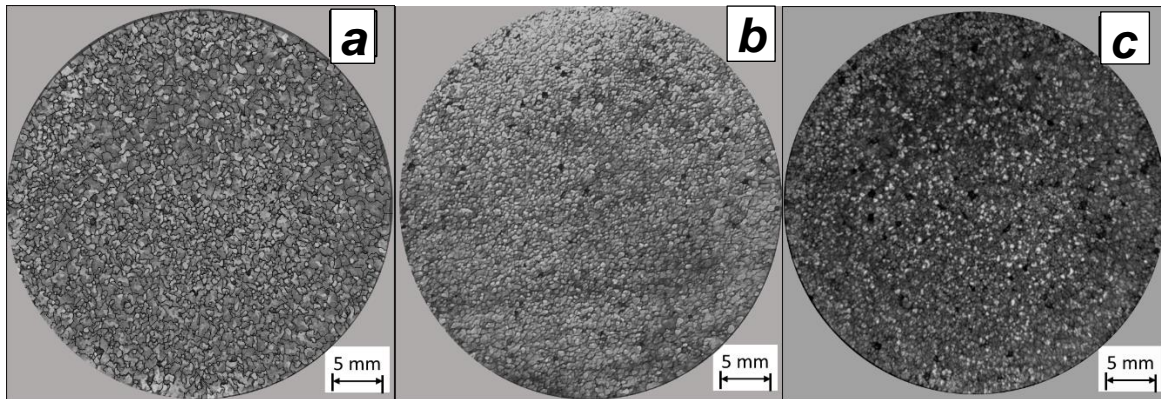


Figura 4.5 Macroestructuras obtenidas de la aleación Al-Cu 33, con a) 75 L/ min, b) 100 L/min y c)150 L/min.

La **Tabla 4.1** contiene, para cada eutéctico bajo estudio, los resultados de densidad de granos asociados con cada flujo de aire de enfriamiento, así como la velocidad de enfriamiento medida al inicio de la solidificación. La velocidad de enfriamiento se determinó como el promedio de las velocidades de enfriamiento asociadas a cinco datos de temperatura antes y cinco después de la temperatura eutéctica considerando un lapso de medio segundo entre cada dato en vista de que la frecuencia de adquisición fue de 2 Hz.

Se observa en todos los casos que existe un incremento en la densidad de granos conforme se incrementa la velocidad de enfriamiento, lo cual está asociado con la activación de un mayor número de sitios de nucleación, y que para flujos de aire iguales existen ligeras variaciones en la velocidad de enfriamiento, como resultado de las diferentes propiedades termofísicas y temperaturas eutécticas.

La **Figura 4.6** muestra la variación de la densidad de granos como una función de la velocidad de enfriamiento. La recopilación de modelos de nucleación mostrada por Stefanescu [1], donde compila ecuaciones empleadas desde 1966 las cuales muestran una dependencia entre la velocidad de enfriamiento y la densidad de granos reflejando una correlación directa, ya que al tener mayor velocidad de enfriamiento se presenta mayor cantidad de núcleos que compiten en el crecimiento limitando su tamaño. En el caso de las muestras estudiadas de los eutécticos Al-Cu, Al-Ni y Al-Si, muestran un aumento de densidad de granos al aumentar la velocidad de enfriamiento. El Al-Cu aumenta la densidad pasando de 5.01×10^8 a 6.05×10^9 (núcleos por metro cubico), partiendo de -0.48 a -1.97 ($^{\circ}\text{C s}^{-1}$), mientras que Al-Si aumenta su densidad de 1.19×10^9 a 6.77×10^9 (núcleos por metro cubico) pasando de -0.88 a 2.37 ($^{\circ}\text{C s}^{-1}$) respectivamente, siendo Al-Ni el caso más sensible de cambio en densidad de granos como resultado del aumento de velocidad de enfriamiento, cambiando de 4.26×10^9 a 6.77×10^{10} (núcleos por metro cubico) con un cambio en la velocidad de enfriamiento de -0.88 a 2.37 ($^{\circ}\text{C s}^{-1}$). Los cambios en la velocidad de enfriamiento en función del flujo de aire para los tres eutécticos son debidos a las diferentes

propiedades termofísicas generadas por el elemento aleante; mientras que la densidad de granos es modificada por la presencia de sustratos específicos de cada sistema y por la interacción entre cada elemento y la matriz de aluminio afectando diversas propiedades como la tensión interfacial de las fases que son generadas.

Tabla 4.1 Densidad de granos de los tres sistemas a diferente velocidad.

Composición	Flujo de aire [Litros min ⁻¹]	Velocidad de enfriamiento [°C s ⁻¹]	Densidad de granos [# Granos m ⁻³]
Al-Si	75 ± 3.75	-0.88 ± 0.05	1.19 x 10 ⁹ ± 2.36 x 10 ⁶
Al-Si	100 ± 5.00	-1.49 ± 0.01	2.59 x 10 ⁹ ± 2.70 x 10 ⁶
Al-Si	150 ± 7.50	-2.37 ± 0.04	6.77 x 10 ⁹ ± 7.02 x 10 ⁸
Al-Cu	75 ± 3.750	-0.48 ± 0.01	5.01 x 10 ⁸ ± 2.30 x 10 ⁷
Al-Cu	100 ± 5.00	-0.93 ± 0.04	1.17 x 10 ⁹ ± 7.97 x 10 ⁷
Al-Cu	150 ± 7.50	-1.97 ± 0.06	6.05 x 10 ⁹ ± 8.42 x 10 ⁸
Al-Ni	75 ± 3.75	-0.79 ± 0.05	4.26 x 10 ⁹ ± 4.67 x 10 ⁸
Al-Ni	100 ± 5.00	-1.56 ± 0.03	7.78 x 10 ⁹ ± 1.01 x 10 ⁸
Al-Ni	150 ± 7.50	-2.36 ± 0.04	6.77 x 10 ¹⁰ ± 1.15 x 10 ⁹

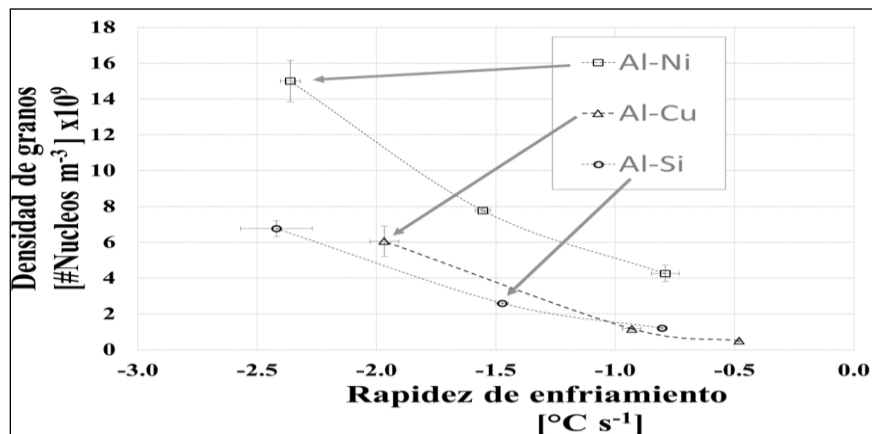


Figura 4.6 Gráfico de la variación de densidad de grano de los tres sistemas respecto a la velocidad de enfriamiento.

4.1.4 Modificación propuesta del método de Dioszegi.

Durante el desarrollo del proceso de cálculo se encontró en todos los casos, que si se implementa el método de Dioszegi con los límites expuestos por los autores Dioszegi y Svensson [75], que consisten en tomar todos los datos cinéticos considerando el lapso comprendido entre el inicio y fin de la solidificación, se presentan aberraciones de comportamiento no lineal que impactan en la determinación de los parámetros exponencial y pre-exponencial de la cinética de crecimiento por lo cual proponemos una modificación a dicho método para que proporcione valores de los parámetros de crecimiento de grano capaces de reproducir, cuando son empleados en micromódulos de solidificación, de mejor manera la curva de enfriamiento simulada con respecto a la experimental.

En la **Figura 4.7** se muestran las curvas cinéticas obtenidas de la aleación eutéctica Al-Cu enfriada con 150 litros por minuto de aire, con la información obtenida de la evolución de la fracción sólida tanto de Fourier como Newton de acuerdo con el método propuesto por Dioszegi que consiste en considerar todos los puntos de la curva de enfriamiento, desde el inicio hasta el fin de la solidificación para estimar el subenfriamiento. El comportamiento de los datos muestra un bucle que al momento de realizar la regresión lineal provoca que los coeficientes de crecimiento cinético de grano obtenidos no representen de manera cercana al comportamiento térmico experimental, al ser utilizados para simular la curva de enfriamiento experimental.

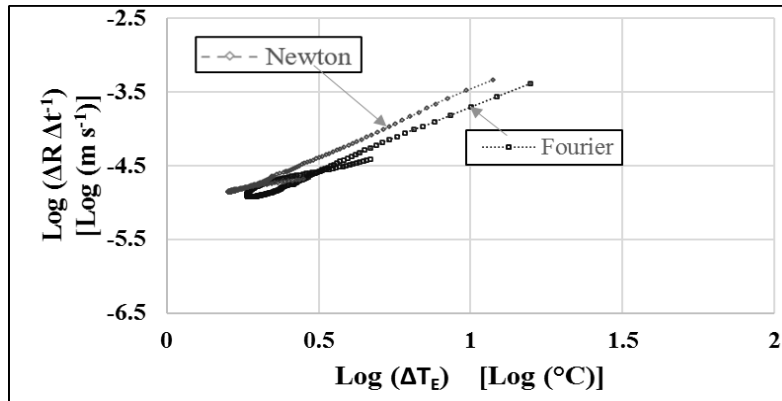


Figura 4.7 Gráfico de análisis cinético de Dioszegi en la aleación eutéctica Al-Cu enfriado con 150 litros por minutos de aire aplicado.

La **Figura 4.8** muestra la curva de enfriamiento experimental en el caso de aluminio silicio enfriado por un flujo de 150 litros por minuto, así como las curvas de enfriamiento simuladas por el micro-macro modelo elaborado para la validación utilizando los coeficientes cinéticos y térmicos obtenidos por el procedimiento original de Dioszegi (Ver **Figura 4.8a**). Se observa que las simulaciones presentan un alejamiento considerable al comportamiento experimental. Esta anomalía se exhibió en todos los casos donde se alimentó el micro macro modelo de solidificación con dichos datos obtenidos por el procedimiento original de Dioszegi, tanto los calculados con el análisis de Newton como Fourier, además de estos se observó en todas las aleaciones evaluadas.

Como consecuencia se modificó el procedimiento de Dioszegi, tomándose los datos de subenfriamiento y evolución de la fracción sólida desde el tiempo de inicio de la solidificación hasta la máxima recalescencia, esto último, como en el método FG, que supone que a partir de este máximo inicia el empalmamiento entre granos en crecimiento. El resultado de aplicar los coeficientes obtenidos por la modificación del método de Dioszegi para simular las curvas de enfriamiento con el micro macro modelo se muestran en la **Figura 4.8b**. Al compararlo con la aplicación de los parámetros provenientes del método de Dioszegi original, es ampliamente notoria la mejora en la aproximación de las curvas de enfriamiento simuladas con respecto a la curva experimental.

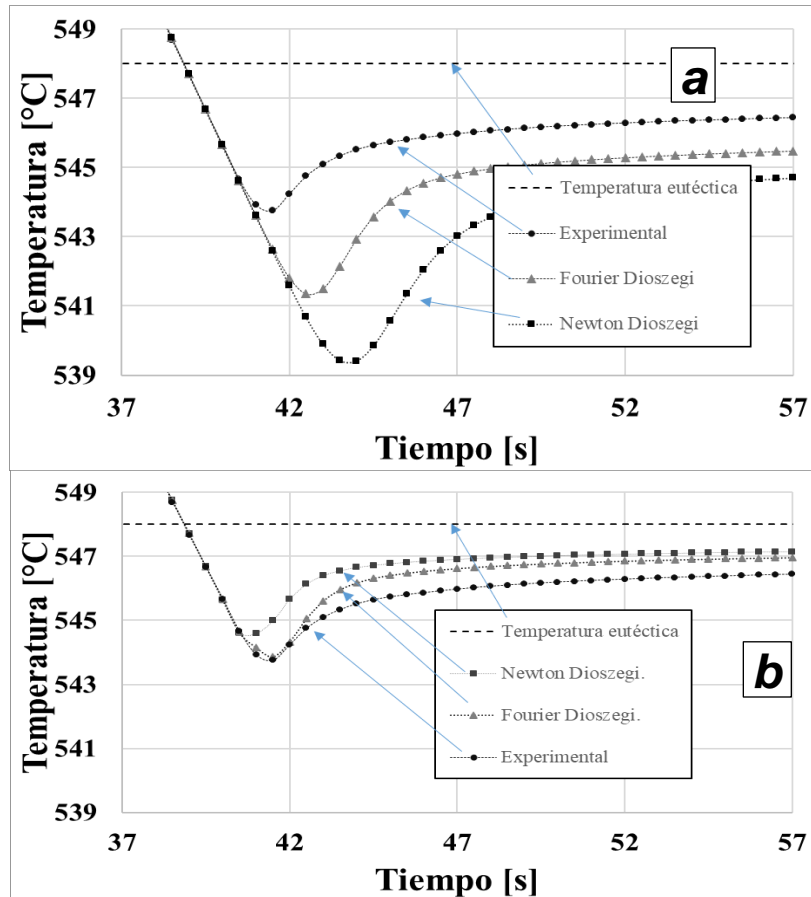


Figura 4.8 Gráficos de los datos experimentales de la aleación Al-Cu enfriada con 150 litros por minuto de aire y resultados de simulación con los datos cinéticos de Dioszegi con la evolución de la fracción sólida de Newton y Fourier, a) coeficientes obtenidos de la evaluación de Dioszegi original y b) aplicación de los coeficientes con Dioszegi modificado.

Como consecuencia de lo anterior se aplicó el método de Dioszegi modificándolo, tomando solamente los puntos de la curva de enfriamiento que van del máximo subenfriamiento a la máxima recalentamiento. Con esto se obtuvieron valores de los parámetros de crecimiento con un buen desempeño al ser empleados para la simulación de las curvas de enfriamiento.

Todo lo anterior sugiere que para obtener valores de parámetros de crecimiento adecuados para su empleo en modelos mecánicos, el método de Dioszegi debe ser modificado como se propone en este trabajo.

A continuación, todos los resultados referidos al método de Dioszegi fueron obtenidos con la modificación propuesta.

4.1.5 Determinación de parámetros cinéticos de crecimiento de grano en aleaciones eutécticas.

En las **Figuras 4.9 a 4.11** se muestran las gráficas del logaritmo de la velocidad de crecimiento versus el logaritmo del subenfriamiento obtenidos aplicando los tres métodos de análisis cinético con la información obtenida de los análisis de Newton y Fourier,

mostrando un ejemplo de cada velocidad de enfriamiento para la aleación Al-Cu. Las curvas correspondientes a las aleaciones con Níquel y Silicio se encuentran en el **Anexo VII**.

Recordando que, en la gráfica logarítmica de la velocidad de crecimiento de grano contra el subenfriamiento, la ordenada al origen está asociada al logaritmo del coeficiente pre exponencial y que la pendiente representa al coeficiente exponencial de crecimiento de grano, la **Figura 4.9**, correspondiente a la aleación Al-Cu con una velocidad de enfriamiento de 75 litros por minuto, muestra que los resultados obtenidos por cada análisis indican una ordenada al origen diferente, como resultado de los procedimientos diferentes empleados por cada método.

La **Figura 4.9** muestra que con Dioszegi se visualiza un cambio de pendiente en la parte baja de los subenfriamientos, lo cual afecta a los valores obtenidos de pendiente promedio y de ordenada al origen, diferentes a los obtenidos por los otros métodos. En los resultados asociados a los métodos FG y Degand se nota una pendiente con menos cambios en función del subenfriamiento para FG, y una pendiente fija para Degand, ya que este supone una pendiente constante e igual a dos. Se observa también en esta figura que para el caso de la aplicación de Degand es más evidente la diferencia en el desplazamiento de los resultados como resultado de emplear Newton o Fourier para estimar la velocidad de crecimiento de grano.

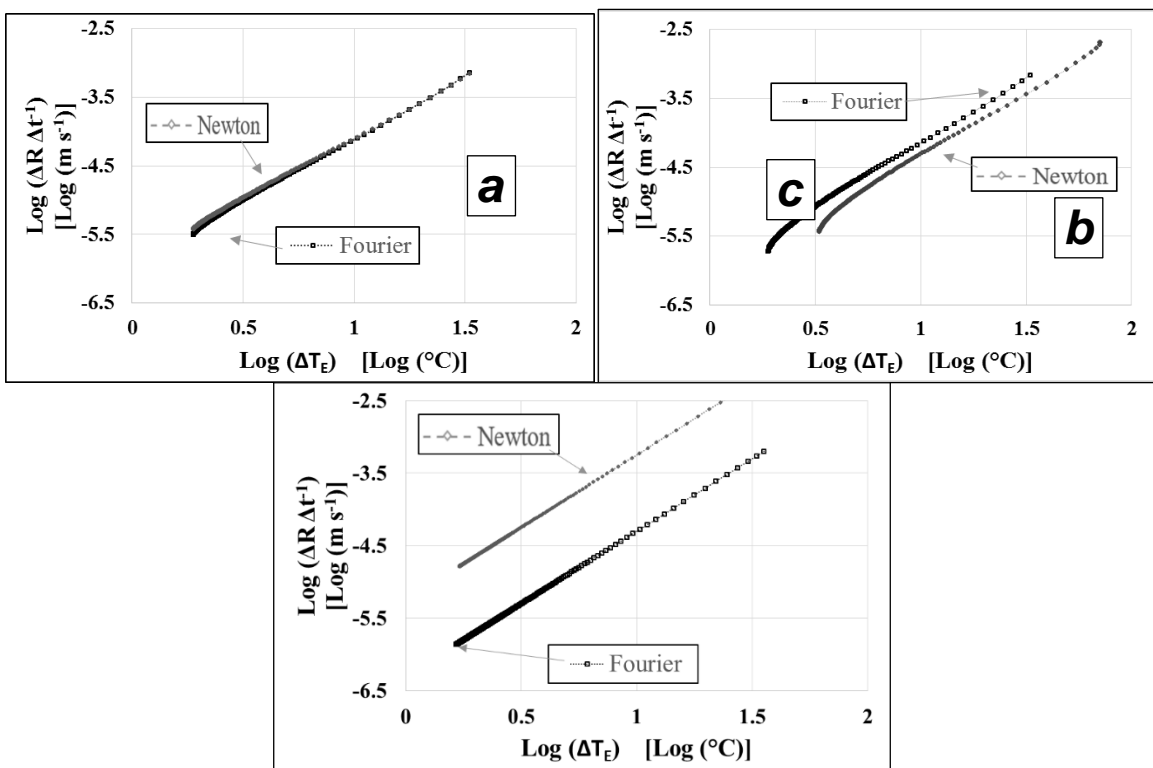


Figura 4.9 Gráficos de resultados de la aplicación de los métodos de crecimiento equiaxial eutéctico de la aleación Al Cu 33 enfriado con 75 Litros por minuto de aire dado por el método de Fourier. a) FG, b) Dioszegi y c) Degand.

En la **Figura 4.10** se muestra el resultado de la aplicación de los métodos de análisis cinético de crecimiento de grano al caso de Al-Cu con una velocidad de enfriamiento obtenida de la aplicación de 100 litros por minuto de aire. Como en el caso con el flujo de 75 litros por minuto se muestran para cada método un desplazamiento de las curvas

obtenidas en función del empleo de los métodos de Newton o de Fourier para estimar la velocidad de crecimiento de grano, lo cual provoca cambios medibles en las ordenadas al origen y se observan ligeros cambios en las pendientes obtenidas. Las diferencias con la **Figura 4.9** se dan con respecto a que las curvas se muestran en todos los casos desplazadas hacia arriba estimando un resultado menor del logaritmo del coeficiente pre-exponencial, mientras muestra una pendiente similar.

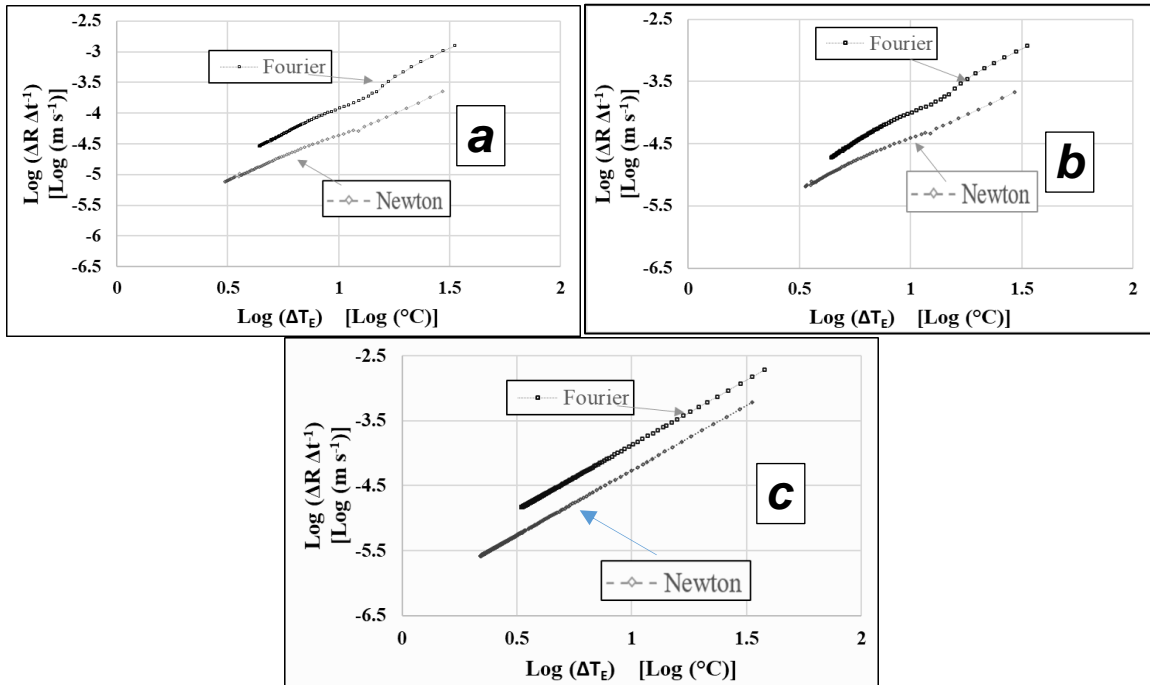


Figura 4.10 Gráficos de resultados de la aplicación de los métodos de crecimiento equiaxial eutéctico de la aleación Al Cu 33 enfriado con 100 Litros por minuto de aire dado por los métodos de Fourier y Newton. a) FG, b) Dioszegi, y c) Degand.

La **Figura 4.11** muestra los resultados de la aplicación de los métodos de análisis cinético para la aleación eutéctica Al-Cu con flujo de aire de 150 litros por minuto, mostrando las mismas características generales observadas en las **Figuras 4.10** y **4.11** así como un desplazamiento hacia arriba con respecto a esas figuras. Lo anterior indica claramente que el valor del coeficiente preexponencial se incrementa conforme aumenta la velocidad de enfriamiento, indicando en consecuencia un incremento en la velocidad de crecimiento de grano.

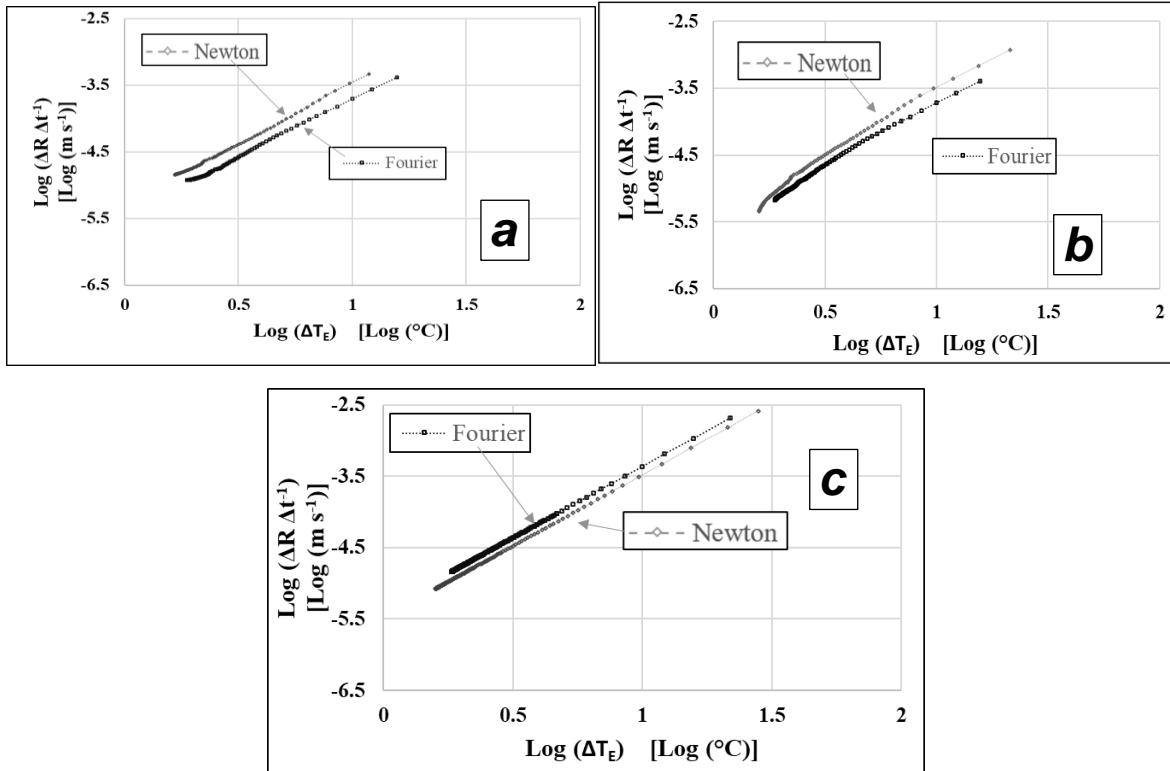


Figura 4.11 Gráficos de resultados de la aplicación de los métodos de crecimiento equiaxial eutéctico de la aleación Al Cu 33 enfriado con 150 Litros por minuto de aire dado por los métodos de Fourier y Newton. a) FG, b) Dioszegi, y c) Degand.

4.1.6 Efectos de la velocidad de enfriamiento en los parámetros cinéticos de aleaciones eutécticas y validación inicial de los valores obtenidos.

En la **tabla 4.2** se observan los coeficientes exponenciales y pre-exponenciales obtenidos de los datos experimentales de la aleación Al-Cu, por los métodos FG, Dioszegi y Degand. Los resultados indican que los datos obtenidos del coeficiente exponencial son cercanos a un valor de “2” determinado por el modelo de crecimiento de eutécticos regulares presentado en el **Capítulo 2**. También se observa en esta tabla que los menores valores de intervalo de confianza se obtuvieron para el método FG combinado con Newton y con Fourier lo cual sugiere que el empleo de estas combinaciones tiene una mayor reproducibilidad que las otras combinaciones analizadas en este trabajo. En cuanto al coeficiente pre-exponencial, los valores con un intervalo de confianza menor corresponden a la combinación de los métodos de Fourier y FG, mientras que las mayores se presentan en los casos de Dioszegi en ambas evoluciones de fracción sólida

Tabla 4.2 Parámetros cinéticos de solidificación de la aleación eutéctica Al-Cu diferentes flujos de aire de enfriamiento obtenidos con los métodos Fourier y Newton, así como los análisis FG y Dioszegi.

Litros por minuto	FG		Dioszegi		Degand	
	Newton	Fourier	Newton	Fourier	Newton	Fourier
75	$\mu=7.05 \times 10^{-7} \pm 6.91 \times 10^{-9}$	$\mu=7.01 \times 10^{-7} \pm 1.47 \times 10^{-9}$	$\mu=2.91 \times 10^{-7} \pm 5.95 \times 10^{-9}$	$\mu=2.67 \times 10^{-7} \pm 1.06 \times 10^{-8}$	$\mu=8.14 \times 10^{-6} \pm 9.65 \times 10^{-7}$	$\mu=5.51 \times 10^{-7} \pm 1.63 \times 10^{-8}$
	$n=2.01 \pm 0.04$	$n=2.01 \pm 0.02$	$n=1.89 \pm 0.15$	$n=1.91 \pm 0.15$	$n=2.00$	$n=2.00$
100	$\mu=1.04 \times 10^{-6} \pm 2.07 \times 10^{-8}$	$\mu=1.03 \times 10^{-6} \pm 1.24 \times 10^{-8}$	$\mu=9.64 \times 10^{-7} \pm 7.72 \times 10^{-8}$	$\mu=9.50 \times 10^{-7} \pm 3.80 \times 10^{-8}$	$\mu=5.67 \times 10^{-7} \pm 1.70 \times 10^{-8}$	$\mu=1.17 \times 10^{-6} \pm 4.69 \times 10^{-8}$
	$n=1.66 \pm 0.11$	$n=1.99 \pm 0.02$	$n=2.18 \pm 0.15$	$n=1.77 \pm 0.08$	$n=2.00$	$n=2.00$
150	$\mu=1.86 \times 10^{-6} \pm 1.90 \times 10^{-8}$	$\mu=1.57 \times 10^{-6} \pm 1.55 \times 10^{-9}$	$\mu=1.40 \times 10^{-6} \pm 8.44 \times 10^{-8}$	$\mu=1.44 \times 10^{-6} \pm 7.25 \times 10^{-8}$	$\mu=4.60 \times 10^{-7} \pm 4.51 \times 10^{-9}$	$\mu=5.11 \times 10^{-6} \pm 2.04 \times 10^{-7}$
	$n=2.25 \pm 0.18$	$n=2.03 \pm 0.06$	$n=1.79 \pm 0.08$	$n=1.85 \pm 0.09$	$n=2.00$	$n=2.00$

La **Tabla 4.3** muestra los datos de los parámetros exponencial y pre-exponencial obtenidos por los métodos FG, Dioszegi modificado y Degand en la aleación eutéctica Al-Si. Se presenta las mismas características de la **Tabla 4.2**, con un acercamiento a un valor de “2” para los parámetros exponenciales y un menor valor de intervalo de confianza con la combinación Fourier –FG. En la **Tabla 4.4** se observan los parámetros pre-exponencial y exponencial de la aleación eutéctica Al-Ni, se comprueba que los resultados de la combinación de métodos que arrojan menor variación por intervalo de confianza es la de Fourier-FG.

Tabla 4.3 Parámetros cinéticos de solidificación de la aleación eutéctica Al-Si a diferentes flujos de aire de enfriamiento obtenidos con los métodos Fourier y Newton, así como los análisis FG y Dioszegi.

Litros por minuto	FG		Dioszegi		Degand	
	Newton	Fourier	Newton	Fourier	Newton	Fourier
75	$\mu=1.76 \times 10^{-7} \pm 5.29 \times 10^{-10}$	$\mu=1.82 \times 10^{-7} \pm 1.84 \times 10^{-10}$	$\mu=3.61 \times 10^{-7} \pm 7.22 \times 10^{-9}$	$\mu=2.51 \times 10^{-7} \pm 1.01 \times 10^{-8}$	$\mu=5.711 \times 10^{-8} \pm 1.71 \times 10^{-9}$	$\mu=6.06 \times 10^{-7} \pm 7.87 \times 10^{-8}$
	$n=1.51 \pm 0.17$	$n=2.00 \pm 0.01$	$n=1.34 \pm 0.11$	$n=1.95 \pm 0.16$	$n=2.00$	$n=2.00$
100	$\mu=4.91 \times 10^{-7} \pm 4.97 \times 10^{-9}$	$\mu=5.01 \times 10^{-7} \pm 1.50 \times 10^{-9}$	$\mu=7.74 \times 10^{-7} \pm 1.24 \times 10^{-7}$	$\mu=6.18 \times 10^{-7} \pm 2.47 \times 10^{-8}$	$\mu=4.66 \times 10^{-7} \pm 1.80 \times 10^{-8}$	$\mu=8.62 \times 10^{-7} \pm 5.17 \times 10^{-8}$
	$n=2.18 \pm 0.28$	$n=2.00 \pm 0.01$	$n=1.88 \pm 0.30$	$n=1.39 \pm 0.25$	$n=2.00$	$n=2.00$
150	$\mu=1.02 \times 10^{-6} \pm 4.09 \times 10^{-8}$	$\mu=1.01 \times 10^{-6} \pm 3.02 \times 10^{-9}$	$\mu=2.02 \times 10^{-6} \pm 9.48 \times 10^{-7}$	$\mu=1.65 \times 10^{-6} \pm 1.98 \times 10^{-7}$	$\mu=3.04 \times 10^{-6} \pm 7.90 \times 10^{-7}$	$\mu=8.22 \times 10^{-7} \pm 5.75 \times 10^{-8}$
	$n=2.08 \pm 1.02$	$n=2.02 \pm 0.04$	$n=0.77 \pm 0.02$	$n=0.72 \pm 0.04$	$n=2.00$	$n=2.00$

Tabla 4.4 Parámetros cinéticos de solidificación de la aleación eutéctica Al-Ni diferentes flujos de aire de enfriamiento obtenidos con los métodos Fourier y Newton, así como los análisis FG y Dioszegi.

Litros por minuto	FG		Dioszegi		Degand	
	Newton	Fourier	Newton	Fourier	Newton	Fourier
75	$\mu=4.06 \times 10^{-6} \pm 1.21 \times 10^{-7}$	$\mu=4.03 \times 10^{-6} \pm 3.98 \times 10^{-8}$	$\mu=4.52 \times 10^{-7} \pm 9.05 \times 10^{-9}$	$\mu=4.35 \times 10^{-7} \pm 8.71 \times 10^{-6}$	$\mu=3.93 \times 10^{-6} \pm 7.87 \times 10^{-8}$	$\mu=5.72 \times 10^{-6} \pm 6.29 \times 10^{-8}$
	$n=1.96 \pm 0.09$	$n=2.00 \pm 0.02$	$n=1.81 \pm 0.09$	$n=1.93 \pm 0.07$	$n=2.00$	$n=2.00$
100	$\mu=5.13 \times 10^{-6} \pm 5.18 \times 10^{-8}$	$\mu=5.01 \times 10^{-6} \pm 5.52 \times 10^{-9}$	$\mu=5.45 \times 10^{-7} \pm 2.18 \times 10^{-8}$	$\mu=5.16 \times 10^{-7} \pm 1.54 \times 10^{-8}$	$\mu=5.46 \times 10^{-6} \pm 2.18 \times 10^{-7}$	$\mu=1.22 \times 10^{-6} \pm 7.37 \times 10^{-8}$
	$n=1.88 \pm 0.07$	$n=1.99 \pm 0.01$	$n=1.76 \pm 0.10$	$n=1.93 \pm 0.09$	$n=2.00$	$n=2.00$
150	$\mu=8.99 \times 10^{-6} \pm 9.01 \times 10^{-8}$	$\mu=9.00 \times 10^{-6} \pm 9.01 \times 10^{-9}$	$\mu=9.74 \times 10^{-6} \pm 7.79 \times 10^{-7}$	$\mu=1.00 \times 10^{-5} \pm 7.06 \times 10^{-7}$	$\mu=2.82 \times 10^{-5} \pm 2.82 \times 10^{-7}$	$\mu=5.11 \times 10^{-6} \pm 2.04 \times 10^{-7}$
	$n=2.28 \pm 0.37$	$n=2.03 \pm 0.06$	$n=1.83 \pm 0.18$	$n=1.95 \pm 0.15$	$n=2.00$	$n=2.00$

Con los parámetros cinéticos obtenidos se graficó en la **Figura 4.12** el valor del parámetro exponencial en función de la velocidad de enfriamiento. Aquí se presentan los resultados de la combinación Fourier-FG que son los que mostraron una menor variación entre sí y que mejor reprodujeron las curvas de enfriamiento experimental, como se muestra más adelante. Si los resultados obtenidos para los parámetros exponenciales de los tres eutécticos a las tres velocidades de enfriamiento experimental se comparan con el valor de dos, que es el asociado con la teoría de los eutécticos regulares, se muestra que el valor promedio es muy cercano a 2 en todos los casos se presentó variación y tomando en cuenta los intervalos de confianza asociados hay en todos los casos un traslape con este valor.

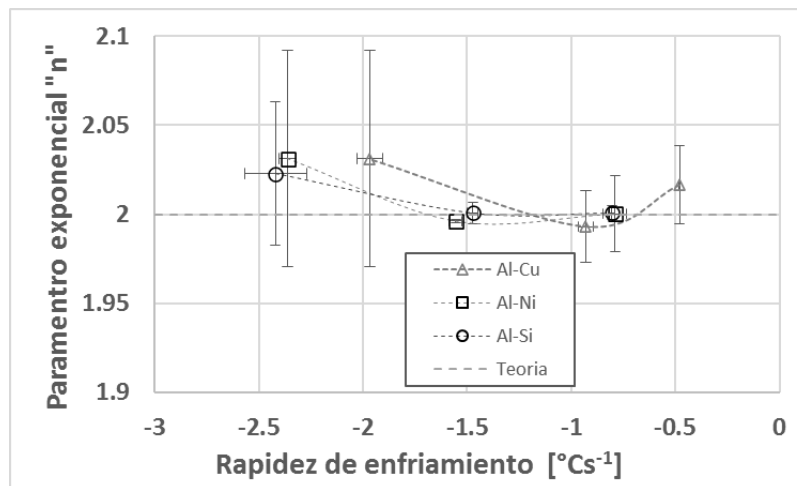


Figura 4.12 Parámetro exponencial obtenido de la combinación Fourier-FG respecto a la velocidad de enfriamiento mostrando las tres aleaciones de composición eutéctica estudiadas.

Al graficar los resultados del coeficiente pre-exponencial con la velocidad de enfriamiento (ver **Figura 4.13**) se encontró que conforme se incrementa la velocidad de enfriamiento, el coeficiente aumenta en todos los casos, siendo la aleación con Níquel la más sensible en dicho cambio.

Se requiere una validación para establecer que tan pertinentes son estas tendencias y estos valores obtenidos para los parámetros exponenciales y pre-exponenciales ya que la combinación de ambos es la que define la cinética de crecimiento de grano en función del subenfriamiento para los eutécticos bajo estudio.

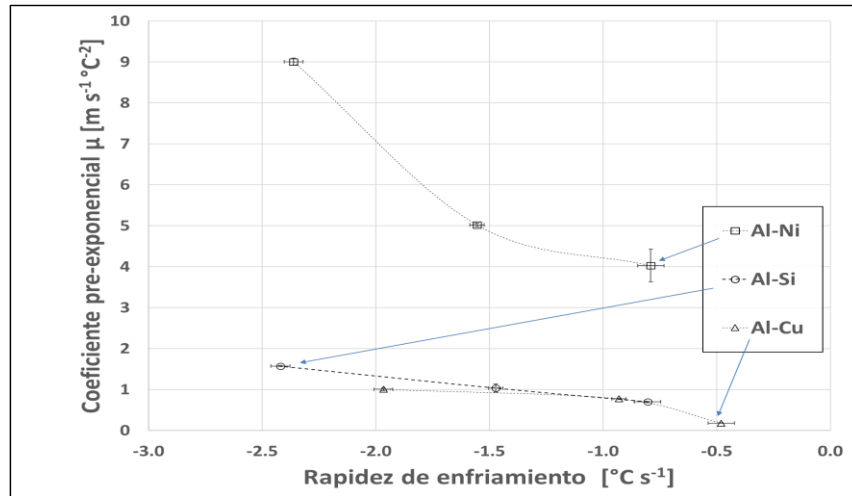


Figura 4.13 Coeficiente pre-exponencial en función de la velocidad de enfriamiento para las tres aleaciones

Como primera parte de la validación de los parámetros de crecimiento de grano obtenidos mediante las metodologías propuestas en este trabajo, se realizó la comparación entre los valores de los parámetros pre-exponenciales de crecimiento de grano obtenidos por el método FG combinado con Newton y Fourier con los reportados en la literatura tomando como referencia para el eutéctico Al-Si los valores reportados por Magnin *et al* [72], para Al-Cu los reportados por Ares *et al* [122] y para Al-Ni, los reportados por Kaya *et al* [123] a diferentes velocidades de enfriamiento.

La **Figura 4.14**, muestra la comparación de los valores reportados en la literatura de los coeficientes pre-exponenciales de crecimiento de grano como una función de la velocidad de enfriamiento para los eutécticos bajo estudio con los valores obtenidos mediante el método FG combinado con Newton y con Fourier. Esta figura indica que existe una concordancia cualitativa y cuantitativa aceptable en todos los casos. Lo anterior se afirma en vista de que los valores reportados y generados por la metodología propuesta en este trabajo, al compararse con los valores reportados en la literatura, tienen el mismo orden de magnitud, con valores relativamente cercanos y también muestran las mismas tendencias en el sentido de que un incremento en la velocidad de enfriamiento provoca un aumento en el valor del coeficiente pre-exponencial de crecimiento eutéctico. Esta tendencia, confirmada por los valores reportados y los generados en este trabajo con base en ambos casos, en mediciones experimentales, sugiere que conforme se incrementa la velocidad de enfriamiento, la interfase sólido-líquido eutéctica se desplaza a una mayor velocidad bajo un subenfriamiento dado. Lo anterior concuerda con las evoluciones de fracción sólida en función del tiempo, ver **Figura 4.4**, que muestran que, conforme se incrementa la velocidad de enfriamiento, se reduce la diferencia entre el tiempo de inicio y fin de solidificación, es decir la solidificación se realiza en un menor tiempo, con más velocidad. Esto también es el resultado de que, a mayor velocidad de enfriamiento, existen un mayor número de sitios de nucleación como lo indican las mediciones experimentales de densidad de grano, **Figura 4.6**, y que cada grano que crece alrededor de cada núcleo, lo hace a mayor velocidad como

lo indica el incremento en los valores de los parámetros pre-exponenciales de crecimiento de grano, **Figura 4.14**. En su conjunto y a mayores velocidades de enfriamiento al inicio de la solidificación, la presencia de una mayor densidad de granos que crecen más rápidamente provoca la generación de más calor latente y la consecuencia térmica que se puede observar en las curvas de enfriamiento, ver **Figuras 4.1- 4.3**, es que disminuye el subenfriamiento máximo alcanzado y se eleva la temperatura máxima que muestra la meseta eutéctica.

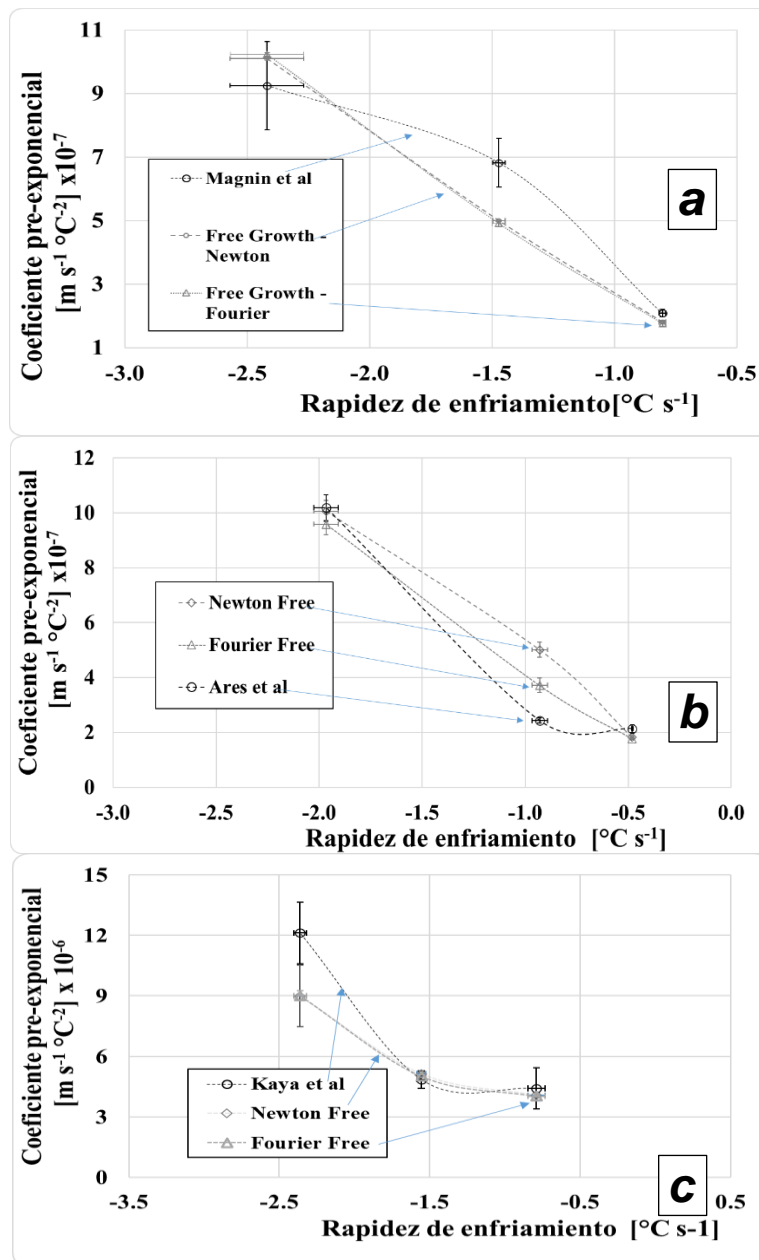


Figura 4.14 Grafica de variación de los coeficientes pre-exponenciales de las aleaciones Al-Si (a), Al-Cu (b) y Al-Ni (c) comparado con la literatura.

4.1.7 Aplicación del método inverso para obtener el coeficiente global de transporte de aleaciones eutécticas.

Con el fin de establecer la pertinencia de los valores obtenidos para los parámetros de crecimiento calculados por el método FG se procedió a utilizarlos, junto con los datos experimentales de densidad de granos en un modelo implementado en un programa de cómputo y descrito en el **Capítulo 2**, para simular las curvas de enfriamiento experimental durante los momentos iniciales de la solidificación. Para simular las condiciones de enfriamiento se utilizaron los valores de coeficientes globales de transferencia de calor h_{∞} en función de la temperatura obtenidos mediante modelado inverso de transferencia de calor aplicado a las curvas de enfriamiento experimentales.

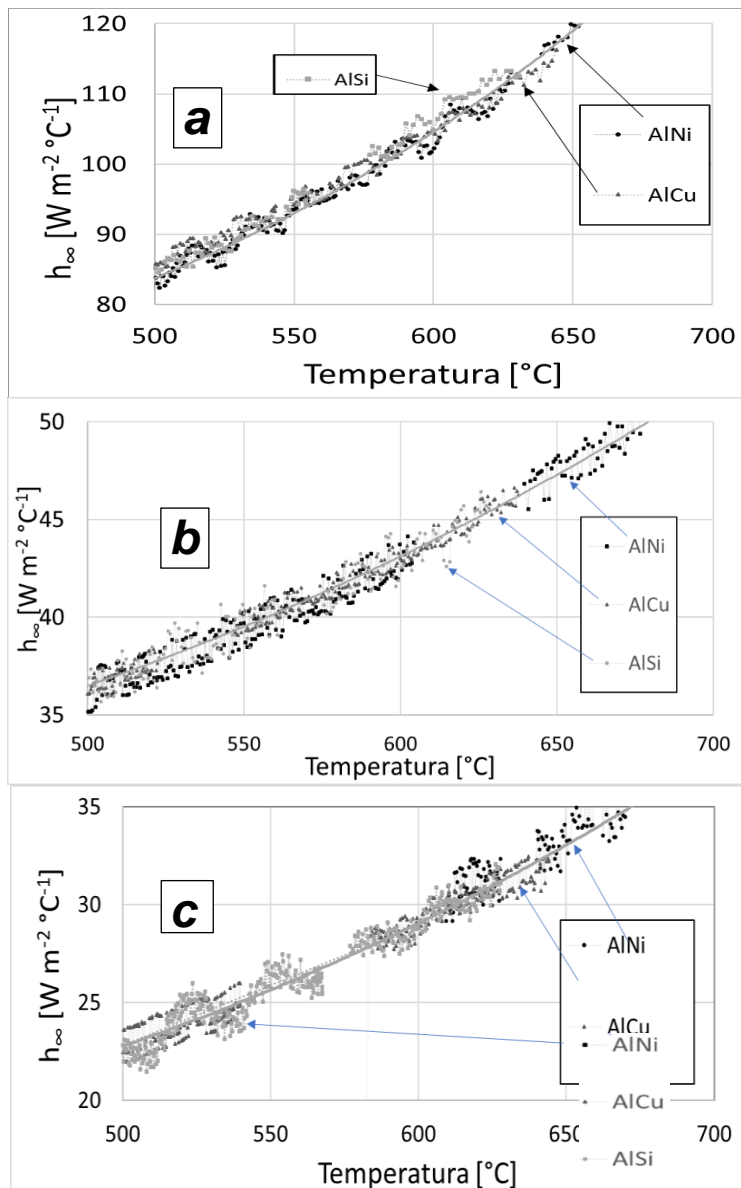


Figura 4.15 Coeficiente combinado de extracción de calor en función de la temperatura, obtenido de la aplicación de un flujo de (a)150, (b)100 y (c) 75 litros por minuto, para las aleaciones eutécticas base aluminio con níquel, cobre y silicio.

Se procedió a procesar numéricamente las curvas de enfriamiento experimentales, como se describe en el **Capítulo 2**, para obtener ecuaciones que describen los valores que adopta el coeficiente global de transferencia de calor h_{∞} en función de la temperatura en cada corrida experimental.

Para tal efecto se empleó la misma curva de enfriamiento que fue utilizada para obtener valores específicos de parámetros de crecimiento para simular cada experimento. Para tal efecto la curva se dividió en tres partes: antes de la solidificación, durante la solidificación y después de la solidificación. Se utilizó el procesamiento de las secciones de la curva antes y después de la solidificación para obtener los valores de los coeficientes de transferencia de calor combinado en función de la temperatura.

La **Figura 4.15** muestra la evolución de los coeficientes de transferencia de calor en función de la temperatura asociados con cada eutéctico para tres curvas de enfriamiento representativas. Se observa en esta figura que, a pesar de ser diferentes las tres aleaciones, los resultados son cercanos en comportamiento. Las oscilaciones de los datos pueden deberse a la extracción de calor por convección dada por el flujo de aire de enfriamiento dentro del dispositivo experimental.

Una vez que se cuenta con la información del coeficiente combinado de transferencia de calor respecto a la temperatura de todos los datos experimentales, se realizó una regresión numérica con el fin de obtener ecuaciones que describan el enfriamiento presente en las muestras durante la experimentación. En la **tabla 4.5** se presentan las ecuaciones que describen la evolución de h en función de la temperatura para los tres eutécticos en las tres condiciones de enfriamiento para las curvas seleccionadas para el estudio.

Tabla 4.5 Parámetros obtenidos de la regresión polinómica de los datos de la evolución del coeficiente combinado de transporte de calor en las diferentes aleaciones y flujos de aire.

Ecuación:		$h_{\infty} = A_{\infty} + B_{\infty} \exp\left(\frac{T}{C_{\infty}}\right)$			
Composición	Flujo de aire [Litros min ⁻¹]	A_{∞} [W m °C ⁻¹]	B_{∞} [W m ⁻² °C ⁻¹]	C_{∞} [°C ⁻¹]	R^2
Al Si	75 ± 3.75	11.70 ± 1.21	1.12 ± 0.38	217.15 ± 23.25	0.99 ± 0.01
Al Si	100 ± 5.00	25.35 ± 0.07	1.13 ± 0.03	212.77 ± 4.07	0.99 ± 0.02
Al Si	150 ± 7.50	44.17 ± 0.55	4.67 ± 0.23	232.55 ± 3.71	0.99 ± 0.02
Al Cu	75 ± 3.75	9.52 ± 0.20	1.88 ± 0.071	232.55 ± 3.7166	0.99 ± 0.02
Al Cu	100 ± 5.00	23.44 ± 0.03	1.90 ± 0.01	256.41 ± 0.70	0.99 ± 0.01
Al Cu	150 ± 7.50	44.54 ± 0.10	2.62 ± 0.04	204.08 ± 1.10	0.99 ± 0.01
Al Ni	75 ± 3.75	9.63 ± 0.71	3.06 ± 0.31	303.03 ± 9.18	0.99 ± 0.01
Al Ni	100 ± 5.00	23.86 ± 0.04	1.78 ± 0.02	250.00 ± 0.92	0.99 ± 0.01
Al Ni	150 ± 7.50	43.89 ± 4.79	4.79 ± 0.27	238.095 ± 4.11	0.99 ± 0.01

4.1.8 Validación y comparación de los parámetros obtenidos mediante su aplicación en el micromacro modelo de aleaciones eutécticas.

Con el propósito de validar los valores obtenidos de los parámetros de crecimiento de grano en cada caso de interés, se procedió a simular las curvas de enfriamiento experimental empleando el modelo mecanístico elaborado para tal efecto y descrito en el **Capítulo 2**. Se utilizaron los valores de coeficiente de transferencia de calor h_{∞} extraídos de las curvas experimentales y presentados en la **tabla 4.5**, la densidad de núcleos determinada experimentalmente y presentados en la **tabla 4.1**, así como los valores obtenidos de los parámetros de crecimiento por cada método en cada caso, así como los reportados en la literatura o los generados mediante el modelo JH modificado por Magnin [73] usando las propiedades termofísicas presentadas en el **Capítulo 2** y el micro-macro modelo mostrado en el **Anexo IX**.

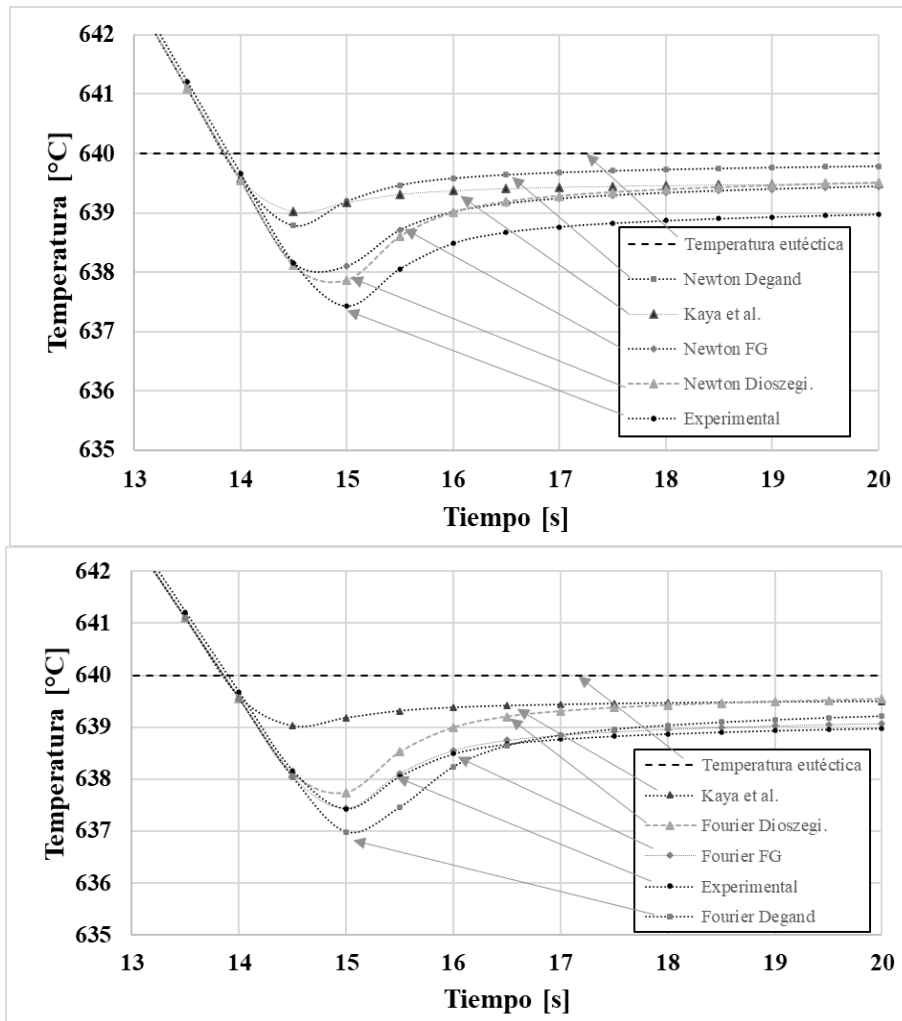


Figura 4.16 Curvas obtenidas por la simulación con los parámetros obtenidos con las combinaciones de métodos Newton (a) y Fourier (b) con FG, Degand y Dioszegi. Aleación Al-Ni eutéctica con un flujo de 150 litros.

De acuerdo con lo anterior se procedió a emplear los parámetros de las ecuaciones generadas por el análisis inverso junto a análisis cinéticos, datos experimentales de densidad de núcleos y las propiedades termo físicas resumidas en la **tabla 2.2** para realizar las simulaciones de las curvas de enfriamiento experimental.

Se presentan a continuación los resultados representativos de cada sistema a diferente condición de enfriamiento para ejemplificar la validación y en el **Anexo VII** se muestran todas las validaciones.

La **Figura 4.16** presenta la sección de la curva de enfriamiento experimental que corresponde al inicio de la solidificación, así como las curvas de enfriamiento simuladas empleando los parámetros de crecimiento obtenidos mediante los diferentes métodos y los métodos de Newton, **Figura. 4.16 a** y de Fourier, **Figura 4.16 b** para describir la evolución de la fracción sólida, para el caso de la aleación aluminio níquel enfriada con 75 litros por minuto. Se observan en la **Figura 4.16a** las curvas de enfriamiento simuladas con los parámetros de crecimiento reportados en la literatura (Kaya *et al* [123]), así como los obtenidos mediante los métodos FG, Degand y Dioszegi junto con el método de Newton. Se observa que la combinación de métodos de Newton y Degand y de Newton y los valores reportados por Kaya [123] proporcionan las curvas simuladas más alejadas del comportamiento experimental. Las curvas simuladas empleando los parámetros de crecimiento de grano generados por los métodos Newton-Dioszegi y Newton-FG tienen un mayor acercamiento al comportamiento experimental.

En la **Figura 4.16 (b)** se puede observar que las curvas de enfriamiento simuladas por los métodos FG, Degand y Dioszegi, cuando se emplea el método de Fourier para obtener la evolución de la fracción sólida, presentan una mayor concordancia con el comportamiento experimental y por tanto una mejor descripción de la evolución de la solidificación. También se observa que la mayor discrepancia se obtiene al emplear los datos de Kaya *et al.* [123].

En la **Figura 4.17** se muestran las comparaciones entre la curva de enfriamiento experimental y las curvas de enfriamiento simuladas por el micro-macro modelo empleando los parámetros de crecimiento reportados en la literatura por Magnin *et.al* [72] así como los obtenidos mediante los métodos bajo estudio, correspondientes a la aleación eutéctica Al-Si enfriadas con un flujo de aire de 100 litros por minuto. En la **Figura. 4.17** se pueden observar las mismas tendencias presentes en la **Figura 4.18**, pero ahora para el eutéctico Al-Si, esto es la generación de curvas de enfriamiento simuladas más cercanas al comportamiento experimental cuando se usa el método de Fourier y la mayor concordancia obtenida al emplear los parámetros de crecimiento de grano generados por los métodos de Fourier FG y Newton FG, así como que la mayor discrepancia se obtiene al emplear los datos de parámetros de crecimiento reportados en la literatura por Magnin *et al* [72].

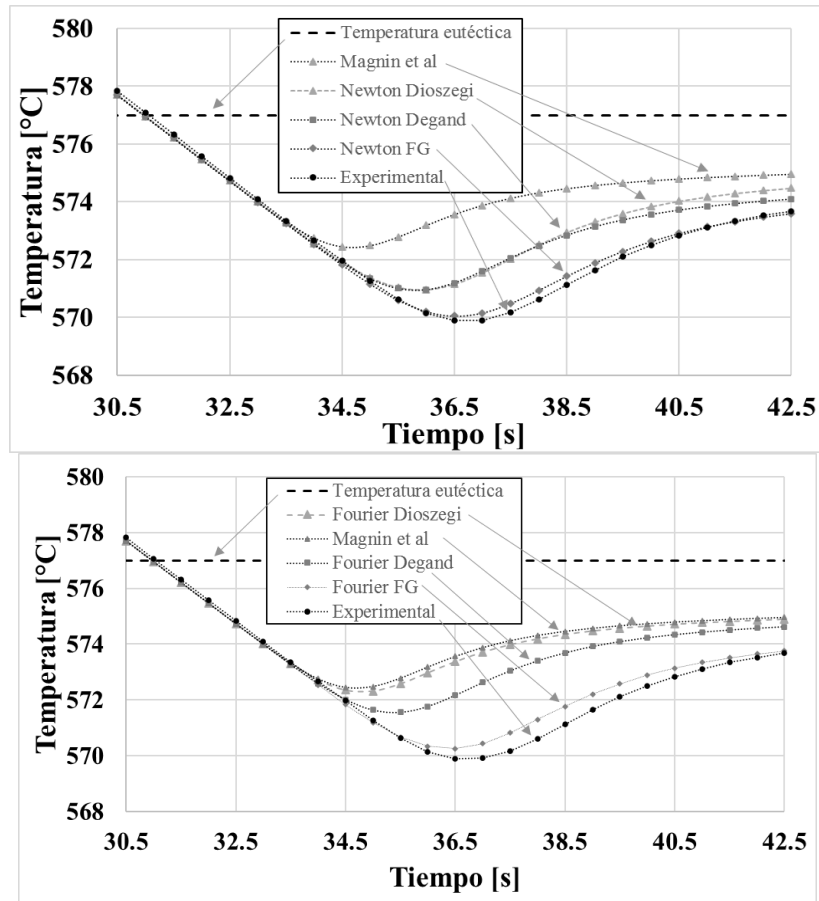


Figura 4.17 Curvas obtenidas por la simulación con los parámetros obtenidos con las combinaciones de métodos Newton (a) y Fourier (b) con FG, Degand y Dioszegi. Aleación Al-Si eutéctica con un flujo de 100 litros.

Las características generales presentes en la **Figura 4.17** también se observan en la **Figura 4.18** para el caso del eutéctico Al-Cu enfriado con 75 litros por minuto de aire. Aquí se puede ver que existen diferencias con las curvas simulada en cada caso. Las curvas simuladas que más se aproximan al comportamiento experimental son las que emplean el método FG, tanto con el método de Newton como con el de Fourier y el empleo combinado de los métodos Fourier FG es el que proporciona las curvas de enfriamiento más cercanas a las experimentales. La mayor discrepancia se obtiene al emplear los datos de parámetros de crecimiento reportados en la literatura por Ares *et.al* [122].

El análisis integral de los resultados mostrados en las **Figuras 4.16 - 4.18** sugiere que, para la obtención de parámetros de crecimiento de grano por los métodos de Degand, Dioszegi y FG, el empleo del método de Fourier, a pesar de ser una técnica más complicada de realizar experimentalmente, proporciona resultados más acertados y confiables que los obtenidos empleando el método de Newton. Comparando los tres métodos se puede observar, que las curvas simuladas utilizando el método FG con Fourier y Newton son las que presentan una mejor concordancia con las curvas de enfriamiento experimental, lo cual sugiere que los parámetros de crecimiento obtenidos por este método pueden ser empleados en modelos mecanísticos para simular el enfriamiento y solidificación de aleaciones eutécticas, obteniendo resultados satisfactorios.

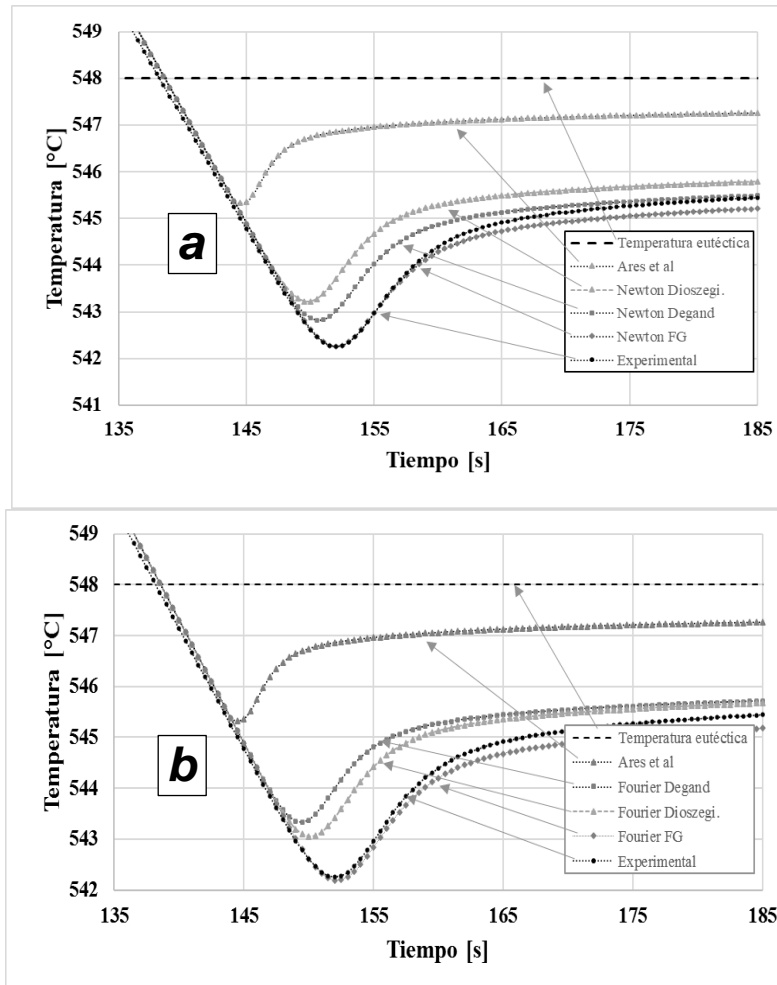


Figura 4.18 Curvas obtenidas por la simulación con los parámetros obtenidos con las combinaciones de métodos Newton (a) y Fourier (b) con FG, Degand y Dioszegi. Aleación Al-Cu eutéctica con un flujo de 75 litros por minuto.

La comparación de la concordancia entre curvas simuladas y experimentales cuando se emplea el método FG junto con Fourier o Newton con respecto al empleo de los valores de parámetros de crecimiento reportados en la literatura o los métodos de Dioszegi y de Degand muestra también la pertinencia del método FG como una nueva alternativa para obtener valores útiles para una mejor simulación de curvas de enfriamiento.

4.2 Aleaciones hipoeutécticas con morfología equiaxial dendrítica.

Esta sección aborda los resultados obtenidos de aleaciones hipoeutécticas base aluminio con 3, 4 y 5% de cobre.

En los tres sistemas bajo estudio se determinó el valor de los parámetros de crecimiento de granos hipoeutécticos equiaxiales semisólidos. La información del análisis de composición química obtenida mediante espectrometría de emisión por chispa se muestra en el **Anexo I**, la densidad de grano en el **Anexo II**, las macros y microestructuras en el **Anexo III**, y la información de la posición de los termopares se encuentra en el **Anexo IV**.

Para las tres aleaciones bajo estudio se aplicaron los métodos FG y Dioszegi y se realizó la validación mediante comparación con datos reportados en la literatura y mediante su empleo en un micro macro modelo de solidificación para simular las curvas de enfriamiento experimental en los instantes iniciales de la solidificación de la fase primaria. Lo anterior se justifica al tener en cuenta la naturaleza de estas aleaciones en los momentos iniciales de su solidificación, ya que inician mediante nucleación heterogénea en el seno del metal y desarrollan granos equiaxiados semisólidos que crecen hasta encontrarse con otros granos semisólidos en crecimiento, en un momento en el que alcanza el punto de coherencia dendrítica y todo el espacio ocupado por la aleación presenta un esqueleto semisólido que continuará su solidificación a través del engrosamiento de las dendritas formadas en esta etapa inicial. Lo anterior implica una importante modificación en la metodología implementada en este trabajo, respecto a los métodos de determinación de parámetros de crecimiento aplicables para aleaciones eutécticas.

En el caso de aleaciones hipoeutécticas bajo estudio, es necesario caracterizar la cinética de crecimiento de grano en el periodo de tiempo comprendido entre el inicio de la solidificación (a partir del cual se realiza la nucleación e inicia el crecimiento de los granos equiaxiados semisólidos) y el instante en que se alcanza el punto de coherencia dendrítica (que marca el instante en que los granos en crecimiento alcanzan entre sí y dejan de crecer). Se requiere entonces de la determinación del punto de coherencia dendrítica para saber qué sección de la curva de enfriamiento se necesita procesar para obtener los parámetros de crecimiento de grano. En las siguientes secciones se detalla la metodología empleada para aplicar los métodos FG y Dioszegi para tal efecto.

4.2.1 Curvas de enfriamiento de aleaciones hipoeutécticas

En la **Figura 4.19** se presentan curvas de enfriamiento típicas de los tres casos de aleaciones hipoeutécticas de interés obtenidas experimentalmente, que corresponden a las aleaciones Al-Cu con contenidos de 3,4 y 5% en peso de Cu. Las líneas horizontales puntuadas corresponden a las temperaturas líquidas a las cuales cada aleación inicia su solidificación.

El análisis de los cambios observados en las curvas mostradas en la **Figura 4.19a** conforme transcurre el tiempo permite caracterizar las siguientes etapas del proceso de enfriamiento y solidificación:

- I. Desde el punto inicial de la curva, al tiempo “0” s, hasta el tiempo de inicio de solidificación (t_{ini}) se identifica la etapa que corresponde al enfriamiento del líquido.
- II. Comprende desde el tiempo de inicio de solidificación (t_{ini}) al tiempo de inicio de solidificación eutéctica (t_{eu}). En este lapso se identifica una etapa en donde solidifica únicamente la fase primaria.
- III. Del tiempo de inicio de solidificación eutéctica (t_{eu}) hasta el tiempo que se presenta el máximo subenfriamiento eutéctico se realiza la solidificación simultánea de la fase primaria y el microconstituyente eutéctico.
- IV. Después del máximo subenfriamiento eutéctico hasta el fin de solidificación (t_{fin}) solidifica únicamente el microconstituyente eutéctico.
- V. Posteriormente al tiempo de fin de solidificación (t_{fin}) hasta el final de la curva se presenta el enfriamiento del sólido.

El interés principal para este trabajo radica en el estudio del crecimiento de grano semisólido el cual ocurre al inicio de la solidificación primaria, desde el tiempo de inicio de solidificación hasta el punto de coherencia dendrítica. Esto corresponde con la zona de las curvas de enfriamiento que se muestran en la **Figura 4.19 b**, ya que se ha encontrado que la solidificación de estas aleaciones se realiza mediante la nucleación y el crecimiento de granos equiaxiales dendríticos semisólidos que crecen hasta que se alcanza la coherencia dendrítica. Estos granos crecen durante las etapas iniciales de la solidificación primaria hasta que se alcanza el punto de coherencia dendrítica, en donde debido al empalmamiento de los granos semisólidos en crecimiento, se forma un esqueleto semisólido en todo el sistema y la solidificación prosigue a través del engrosamiento de los brazos dendríticos.

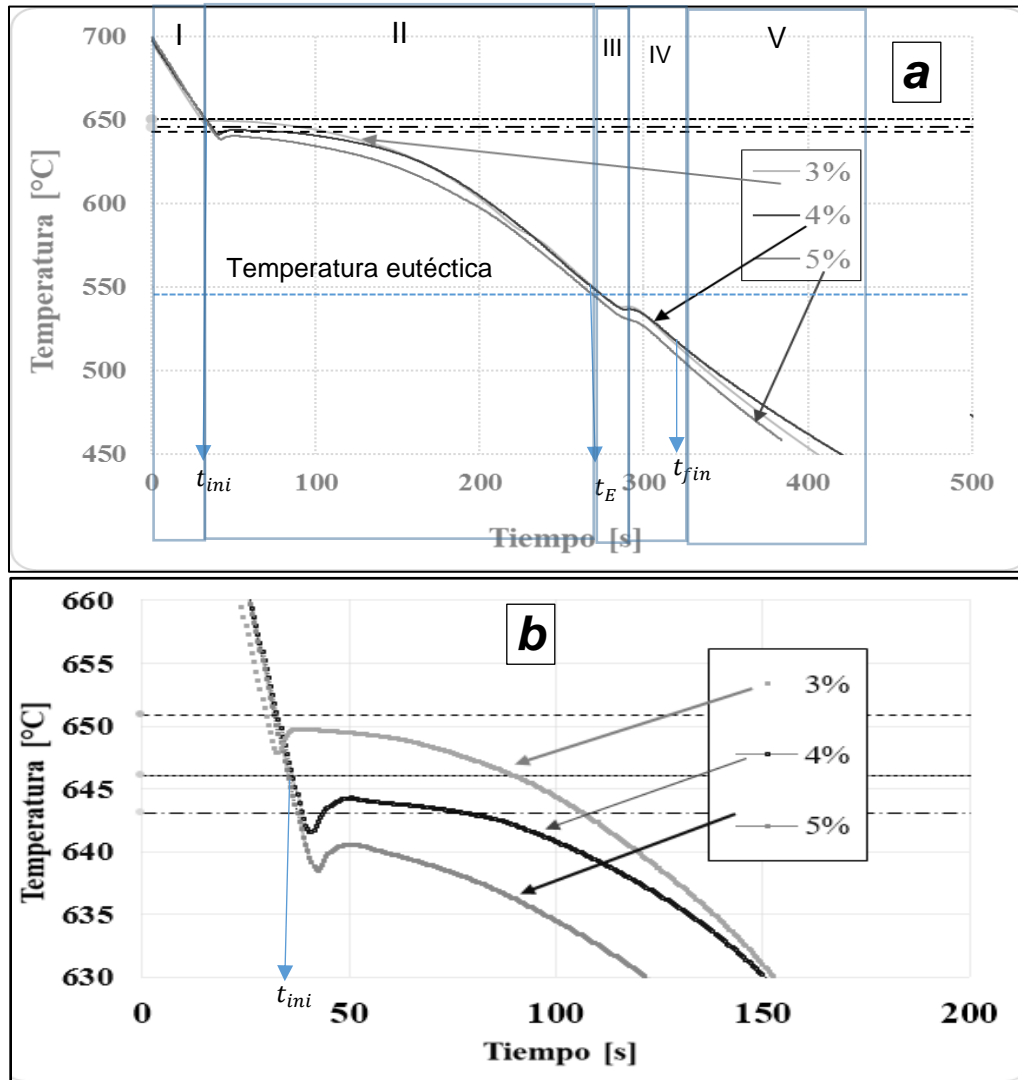


Figura 4.19 Curvas de enfriamiento durante la solidificación de las aleaciones hipoeutécticas aluminio con 3, 4 y 5% de cobre. En (b) se muestra un acercamiento a la zona de inicio de solidificación. Se muestran: t_i es el tiempo de inicio de solidificación de la aleación Al- 4%Cu.

El método FG aplicado a aleaciones hipoeutécticas cambia para tomar en cuenta la existencia de la coherencia dendrítica, la cual determina el fin del crecimiento de los granos semisólidos. En el caso del crecimiento de los granos eutécticos, que son totalmente sólidos, el cálculo del subenfriamiento requerido para aplicar el método FG considera la

diferencia entre la temperatura eutéctica y los puntos de la curva de enfriamiento desde el máximo subenfriamiento hasta la máxima recalescencia.

El método FG aplicado a aleaciones hipoeutécticas, con granos equiaxiales dendríticos semisólidos que crecen hasta que se alcanza el punto de coherencia, requiere además de lo implícito en el caso del crecimiento de granos eutécticos, de la identificación del punto de coherencia dendrítica, ya que el subenfriamiento considerado para los cálculos cinéticos considera el subenfriamiento medido por la diferencia entre la temperatura de inicio de la solidificación y los puntos de la curva de enfriamiento que van del inicio de la solidificación al punto de coherencia dendrítica. Lo mismo aplica conceptualmente para la aplicación del método de Dioszegi.

Esto marca una diferencia sustancial con respecto a la aplicación de la metodología en los granos eutécticos, mostrando la necesidad de identificar el punto de coherencia dendrítica. Para determinar la coherencia dendrítica es necesario conocer tanto los datos de evolución térmica como la evolución de la fracción sólida, que es determinada por los métodos de Fourier y Newton.

4.2.2 Evolución de la fracción sólida en aleaciones hipoeutécticas.

La **Figura 4.20** muestra la evolución de la fracción sólida obtenida de los métodos de Newton y Fourier para la aleación aluminio con 4% de peso de cobre, la diferencia entre cada método es más notoria en los inicios de la solidificación, marcando que el crecimiento del sólido predicho por ambos métodos es muy distinto, siendo con Fourier más lento este crecimiento. Este comportamiento se presentó en todas las curvas de las aleaciones hipoeutécticas evaluadas.

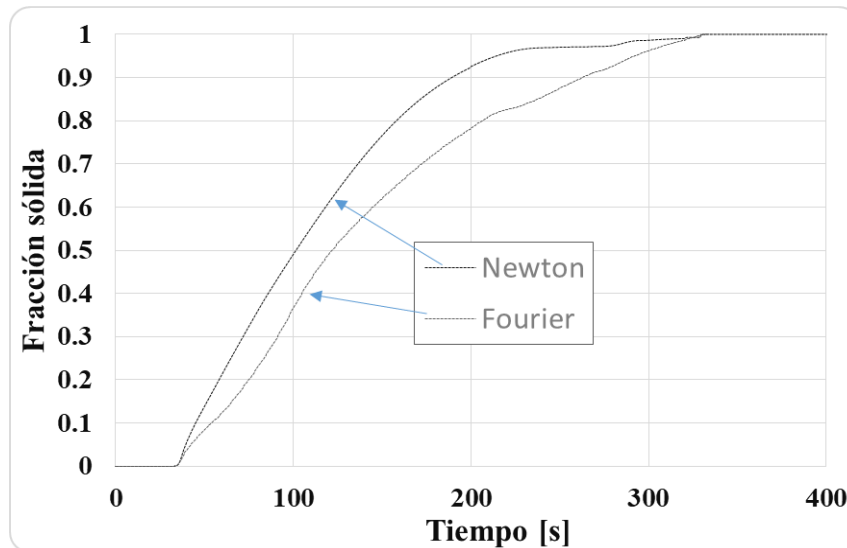


Figura 4.20 Evolución de la fracción sólida obtenida por los métodos de Newton y Fourier de la aleación aluminio con 4 % de cobre.

4.2.3 Determinación del punto de coherencia dendrítico.

Se ha mencionado anteriormente que, en el caso de aleaciones hipoeutécticas se necesita adicionalmente, con respecto al caso de eutécticos, la identificación del punto de coherencia dendrítica (PCD). A este respecto existen diferentes métodos para esta identificación

descritos en el **Capítulo 3**. En este trabajo y por su simplicidad se decidió emplear el método de Djurdjevic [107] en vista de que se obtienen resultados similares a los obtenidos con las otras técnicas y porque no requiere de infraestructura adicional a la ya empleada con los eutecticos y a que es mas facil de implementar experimentalmente. La **Figura 4.21** muestra el resultado del procedimiento de comparación de los resultados arrojados por el método de Djurdjevic [107] donde se grafica la primera derivada de la temperatura como una función de la temperatura y del gradiente térmico entre dos termopares, uno en el centro y otro en la orilla de la muestra, asociado al método de Bäckerud [127] también con respecto a la temperatura. Siguiendo el procedimiento marcado en el **Capítulo 3** donde se busca identificar la coherencia dendritica, se muestra una recta roja que indica la coincidencia entre ambas curvas respecto a la temperatura en el PCD, que es el punto donde se presenta el primer menor gradiente posterior al comienzo de la solidificación, como resultado de la formación de una red semisólida continua que transfiere mejor el calor, así como el primer valor de la derivada posterior al inicio de la solidificación. Ambos fenómenos denotan que el transporte de energía térmica tiene mas eficiencia mostrando que las dendritas se están tocando por primera vez cuando se alcanza la coherencia. Todas las determinaciones experimentales del PCD presentaron la misma identificación y se muestran en el **Anexo V**.

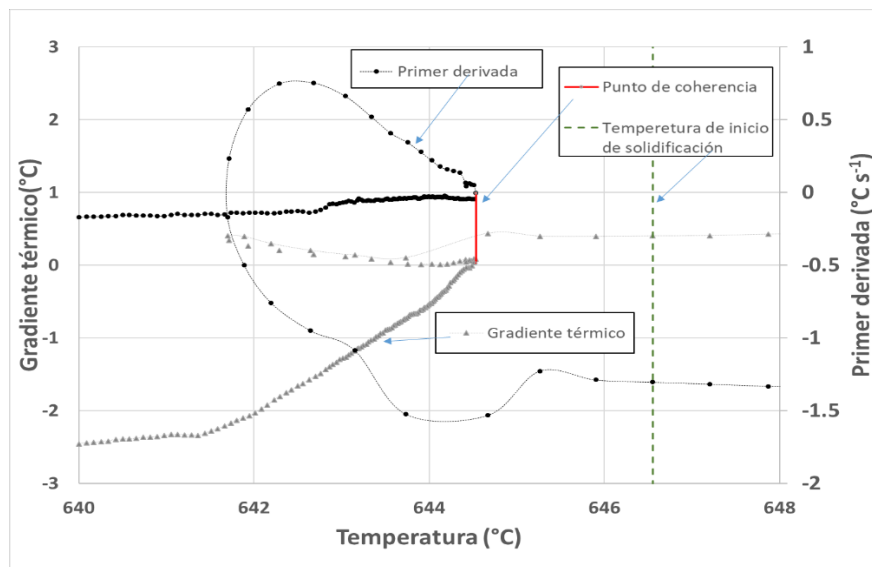


Figura 4.21 Primera derivada de la temperatura respecto al tiempo de la curva de enfriamiento de aluminio cobre al 4% y gradiente térmico de la misma muestra en función de la temperatura, se muestra en rojo el punto considerado de coherencia dendrítica.

En la **Figura 4.22** se muestra al gradiente térmico y la fracción sólida respecto a la temperatura, se ve el punto identificado en la **Figura 4.21** y una línea roja indica la coincidencia entre la temperatura donde se presenta la coherencia dendrítica y la fracción sólida determinada por la aplicación de los métodos de Newton y Fourier, la línea horizontal azul indica la fracción sólida obtenida por el método de Newton y la verde por Fourier, es notorio que con el cálculo de Fourier se estima una menor fracción sólida, ya que la velocidad de crecimiento es más lenta como se visualiza en la **Figura 4.20**, se observó el mismo comportamiento para todas las aleaciones, en el **Anexo VI** se encuentran los resultados de cada aleación.

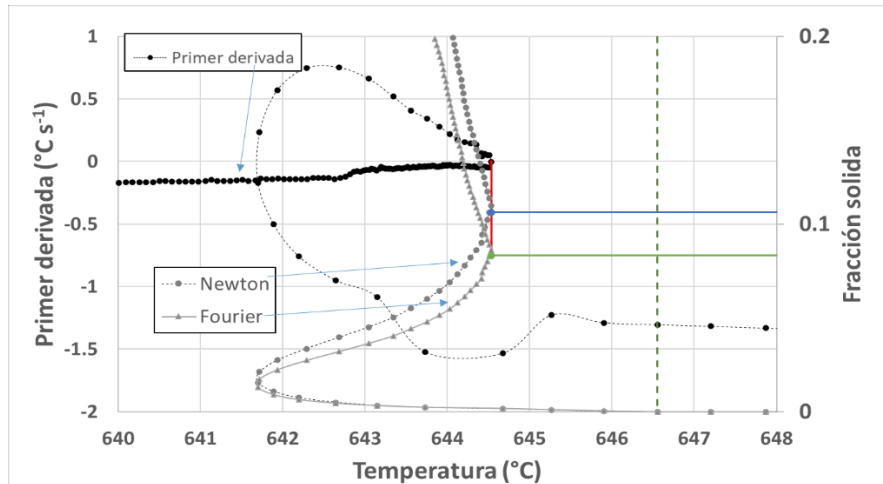


Figura 4.22 Primera derivada de la temperatura respecto al tiempo de la curva de enfriamiento de aluminio cobre al 4% y la evolución de la fracción sólida obtenida por los métodos Newton y Fourier en función de la temperatura, se muestra en rojo el punto considerado de coherencia dendrítica, en azul la coherencia dendrítica obtenida por el método de Newton y obtenida por el método de Fourier.

Empleando el método de Djurdjevic [107] se procedió a determinar los puntos de coherencia dendrítica de las tres aleaciones hipoeutécticas bajo estudio. Con la información de la fracción sólida obtenida por el procedimiento anterior en función del contenido de cobre, se construyó la **Figura 4.23** que muestra la relación entre la fracción sólida en el punto de coherencia y el contenido de cobre. En esta figura se puede observar un incremento claro en la fracción sólida del punto de coherencia conforme se incrementa el contenido de Cu de 3 a 4% seguido de un incremento marginal en la fracción sólida con el incremento del contenido del 4 a 5% de Cu, aunque las dispersiones se encuentran traslapadas. Las variaciones del punto de coherencia dendrítica como función del contenido de soluto en aleaciones hipoeutécticas binarias se ha atribuido al cambio en la morfología de grano que resulta de la mayor micro segregación de soluto presente en las regiones intergranulares e interdendríticas durante el crecimiento del grano semisólido.

También se observa en esta figura, que las fracciones sólidas en el punto de coherencia predichas por los métodos de Newton y Fourier muestran valores similares, con una diferencia máxima entre promedios de 3% aunque las dispersiones se traslapan.

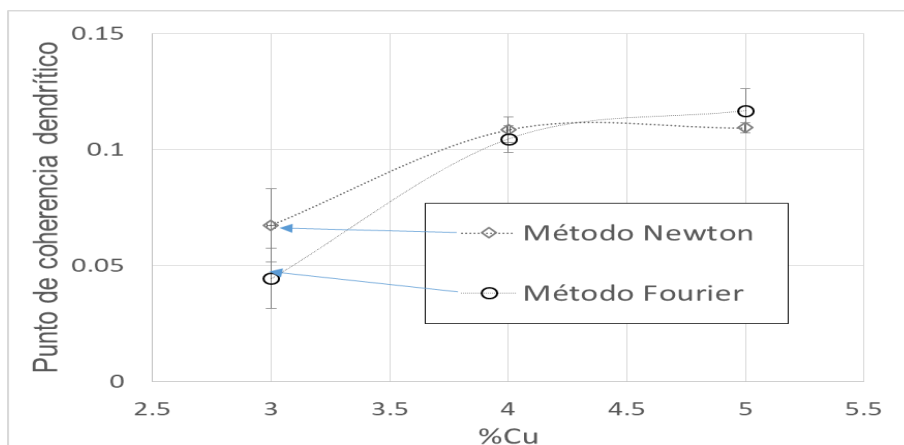


Figura 4.23 Fracción sólida correspondiente a la coherencia dendrítica en función de la composición, obtenidos por los métodos de Newton y Fourier.

4.2.4 Macroestructuras y densidad de grano en aleaciones hipoeutécticas.

La **Figura 4.24** muestra imágenes típicas de las macroestructuras obtenidas de las aleaciones hipoeutécticas aluminio cobre con a) 3%, b) 4% y c) 5%, donde se ven los granos tipo equiaxial, todas fueron enfriadas con un flujo de 100 litros por minuto de aire a la entrada del dispositivo, los datos de la densidad de granos se muestran en el **Anexo III** y el procedimiento metalográfico utilizado para estas determinaciones se presenta en el **Capítulo 3**.

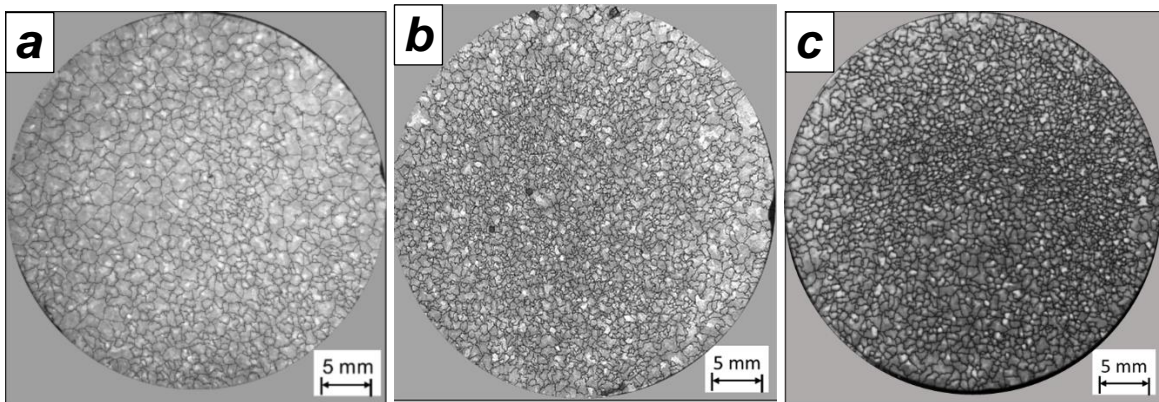


Figura 4.24 Macroestructuras obtenidas de la aleación hipoeutécticas aluminio cobre con a) 3% de cobre, b) 4% cobre y c) 5% cobre.

En la **Figura 4.25** se encuentra graficada la densidad de granos como una función del contenido de cobre. Los resultados mostrados en esta figura sugieren un aumento de la densidad de granos conforme aumenta la concentración de cobre en la aleación, aunque existe un traslape entre las dispersiones de los resultados de 4 y 5 % de cobre indicando un aumento incipiente. Este resultado puede asociarse con el hecho de que a mayor contenido de soluto hay una mayor segregación de éste frente en las regiones intergranulares e interdendríticas lo cual aparentemente disminuye la velocidad de crecimiento del grano semisólido, permitiendo la activación de mayor número de substratos como núcleos heterogéneos, lo cual podría explicar el refinamiento observado de grano.

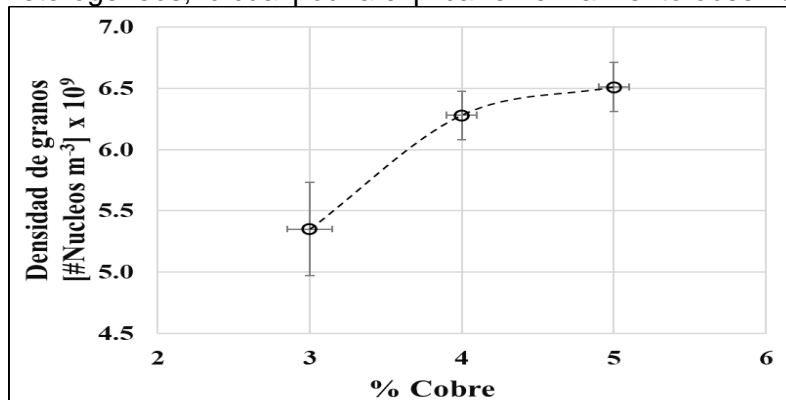


Figura 4.25 Densidad de granos en función de la composición de las aleaciones hipoeutécticas aluminio cobre.

4.2.5 Aplicación de los métodos cinéticos de caracterización de crecimiento de grano en aleaciones hipoeutécticas.

Con la información de la curva de enfriamiento, densidad de granos, evolución de la fracción sólida y punto de coherencia dendrítica se realizó la aplicación de los métodos, de determinación de cinética de crecimiento de grano, mismos que se muestran en la Figura 4.26, con Newton (Dioszegi “a” y FG “b”) y Fourier (Dioszegi “c” y FG “d”). En estas figuras se observa que, ante el aumento de la concentración de cobre, las curvas son desplazadas hacia abajo mostrando con esto que el parámetro pre-exponencial es afectado por la concentración de soluto, disminuyendo siempre su valor conforme se incrementa el contenido de soluto. También se observa en esta figura que, respecto a la pendiente que presenta cada curva, el método de Dioszegi muestra pendientes ligeramente más pronunciadas, ver **Figura 4.26 a y c**, que las obtenidas por el método FG, **Figura 4.26 b y d**, este efecto es más notorio para la aleación Al-5%Cu. Con el método FG aplicado con Fourier se puede ver, **Figura 4.26 d**, que la pendiente se mantiene aproximadamente igual para los tres contenidos de cobre mientras que con el método de Dioszegi la pendiente es prácticamente la misma para 3 y 4% de Cu, pero se incrementa en el caso de la aleación con 5%Cu, ver **Figura 4.26 c**. Los cambios detectados en ordenada al origen y pendiente afectan la velocidad de crecimiento de grano predicha por el modelo de crecimiento y para validarlos se aplicarán estos valores para simular curvas de enfriamiento y compararlas con las experimentales, empleando el micro-macro modelo que considera las etapas características presentadas en el **Capítulo 2**.

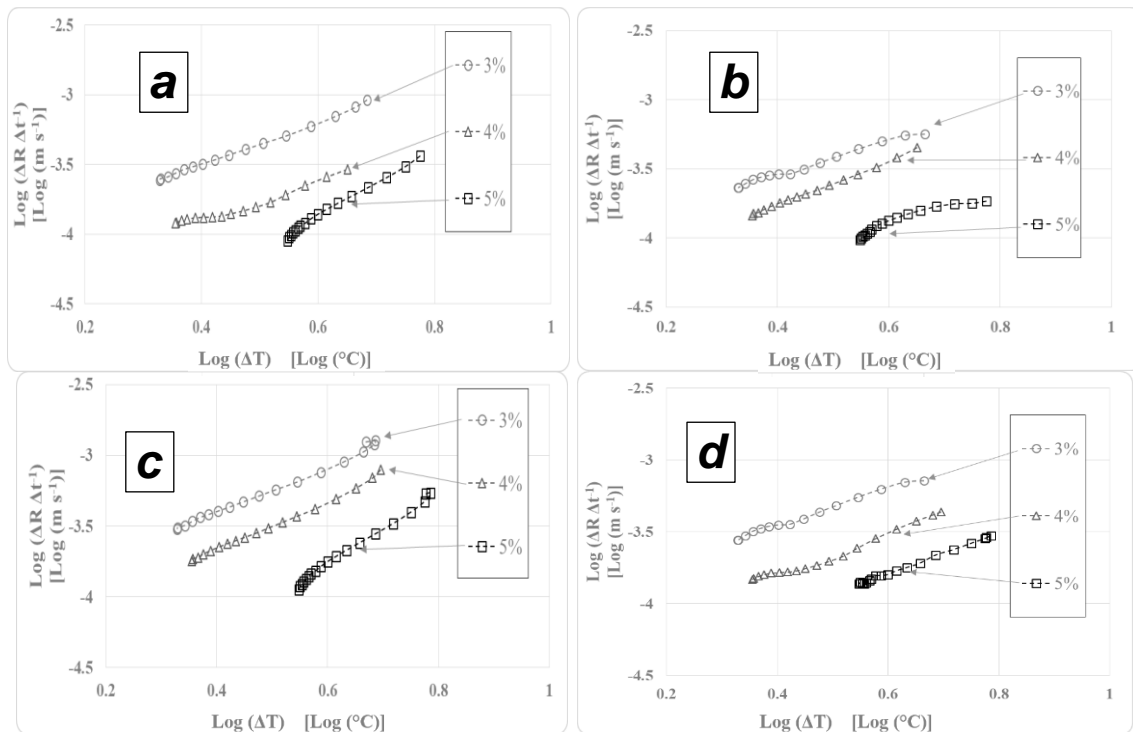


Figura 4.26 Logaritmo de la velocidad de crecimiento del radio de grano versus el logaritmo del subenfriamiento, obtenidos de los métodos de Newton (con Dioszegi “a” y FG “b”) y Fourier (con Dioszegi “c” y FG “d”).

La **Tabla 4.6** contiene los parámetros de crecimiento de grano obtenidos después de la aplicación de los métodos FG y de Dioszegi modificado para las tres aleaciones de composición hipoeutéctica. Los métodos FG y Dioszegi combinados con Newton muestran valores y tendencias similares para los parámetros pre exponenciales, que disminuyen conforme se incrementa el contenido de soluto y para los exponenciales que se incrementan conforme aumenta el contenido de Cu. Por otra parte, para el método FG combinado con Fourier se observa que el parámetro pre exponencial disminuye y el parámetro exponencial también disminuye conforme crece el contenido de Cu. Finalmente, el método de Dioszegi combinado con Fourier predice un crecimiento de μ y oscilaciones en el valor de n entre 2 y 1.5 con tendencia a la baja conforme aumenta el % de Cu.

Considerando que tanto μ como n determinan la variación de la velocidad de crecimiento de grano en función del subenfriamiento y para analizar en mayor detalle los cambios en la cinética de crecimiento de grano provocados por el contenido de soluto, resulta pertinente comparar y graficar las ecuaciones cinéticas que se desprenden de los parámetros mostrados en la **tabla 4.6**, con las predicciones del modelo de Lipton Glicksman y Kurz (LGK), que han sido validados experimentalmente y por lo tanto constituyen una referencia importante para comparación. Dicha comparación se muestra a continuación.

Tabla 4.6 Parámetros cinéticos obtenidos de la aplicación de la combinación de los métodos cinéticos FG y Dioszegi con los métodos de evolución de fracción sólida Newton y Fourier.

Composición de cobre	FG		Dioszegi	
	Newton	Fourier	Newton	Fourier
3%	$\mu=1.23 \times 10^{-4} \pm 1.23 \times 10^{-5}$	$\mu=6.08 \times 10^{-5} \pm 2.43 \times 10^{-6}$	$\mu=1.35 \times 10^{-4} \pm 1.49 \times 10^{-5}$	$\mu=4.21 \times 10^{-5} \pm 2.53 \times 10^{-6}$
	$n=1.71 \pm 0.43$	$n=2.12 \pm 0.40$	$n=1.55 \pm 0.37$	$n=2.01 \pm 0.26$
4%	$\mu=4.97 \times 10^{-5} \pm 4.96 \times 10^{-6}$	$\mu=3.87 \times 10^{-5} \pm 4.06 \times 10^{-7}$	$\mu=6.03 \times 10^{-5} \pm 6.63 \times 10^{-6}$	$\mu=4.99 \times 10^{-5} \pm 1.49 \times 10^{-6}$
	$n=1.86 \pm 0.447$	$n=1.39 \pm 0.41$	$n=1.72 \pm 0.44$	$n=1.46 \pm 0.11$
5%	$\mu=3.44 \times 10^{-6} \pm 1.37 \times 10^{-7}$	$\mu=3.12 \times 10^{-5} \pm 6.25 \times 10^{-7}$	$\mu=3.54 \times 10^{-6} \pm 1.41 \times 10^{-7}$	$\mu=6.29 \times 10^{-5} \pm 3.14 \times 10^{-6}$
	$n=3.09 \pm 0.40$	$n=0.83 \pm 0.29$	$n=2.96 \pm 0.44$	$n=1.74 \pm 0.11$

4.2.6 Comparación de los parámetros de crecimiento de grano obtenidos por el método FG y los generados por el modelo LGK en aleaciones hipoeutécticas Al-Cu.

En la **Figura 4.27** se muestra la comparación de los resultados obtenidos por el método FG(a) y Dioszegi (b), con respecto al resultado de la aplicación del modelo LGK para el parámetro exponencial de crecimiento de grano, mientras que en la **Figura 4.28** se muestran flas comparaciones con respecto al parámetro pre exponencial. Estas figuras indican que existe una concordancia cuantitativa relativamente aceptable en vista de que los valores generados por la metodología propuesta en este trabajo, al compararse con los valores generados por el modelo LGK, tienen el mismo orden de magnitud, con valores

relativamente cercanos, aunque solo la combinación FG y Fourier muestra la misma tendencia que el modelo LGK en el sentido de que un incremento en soluto disminuye tanto al parámetro pre exponencial como al exponencial. Se puede observar que en todos los casos existen discrepancias cuantitativas en los valores obtenidos mediante los métodos estudiados en este trabajo con respecto a las predicciones del modelo LGK.

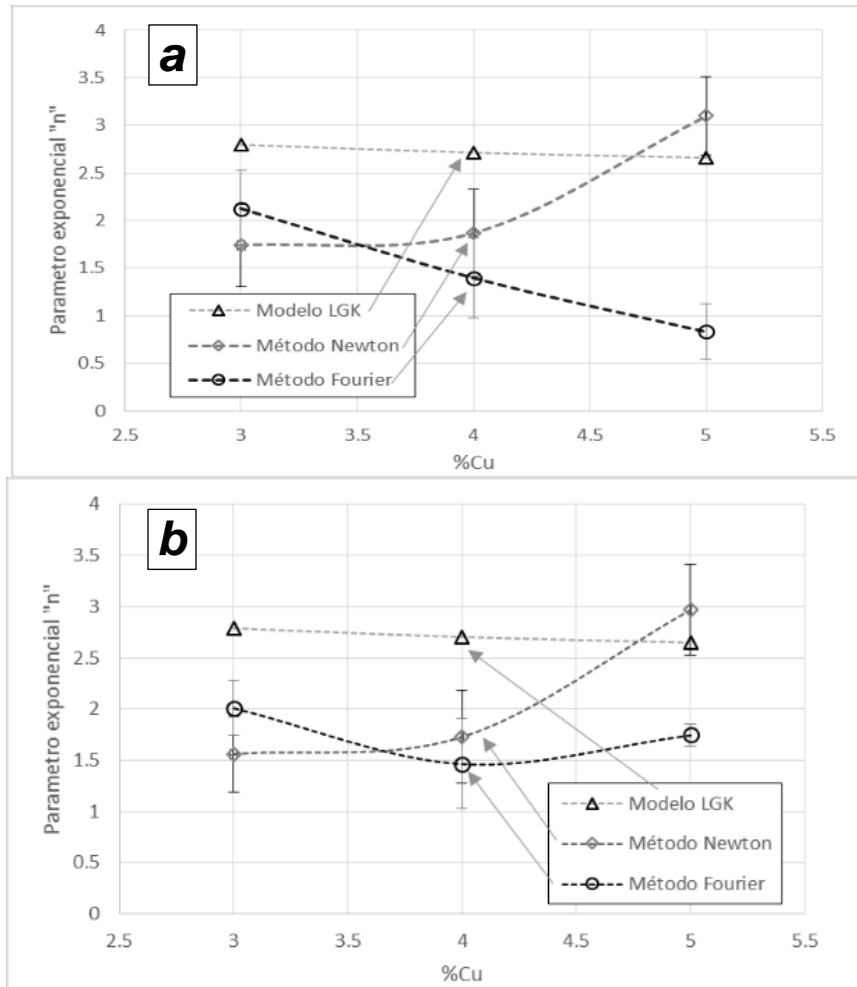


Figura 4.27 Comparación del parámetro exponencial obtenido por los métodos de Newton y Fourier con los análisis FG (a) y Dioszegi (b), respecto al modelo LGK.

Cabe señalar que el modelo LGK fue desarrollado para describir la cinética de solidificación en condiciones de solidificación en un líquido subenfriado y en su momento fue validado experimentalmente en estas condiciones para soluciones binarias succino nitrilo (SCN) - acetona por lo cual se puede asumir que el modelo LGK captura, bajo esas condiciones, los aspectos esenciales más importantes implícitos en la solidificación dendrítica en líquidos subenfriados. Es de destacar que solamente la combinación Fourier-FG predice las mismas tendencias predichas por el modelo LGK de una disminución del parámetro exponencial, así como del parámetro pre exponencial de la velocidad de crecimiento de grano conforme se incrementa el contenido de soluto, aunque como se verá más adelante, la combinación Newton FG también es capaz de reproducir el efecto del contenido de soluto sobre la velocidad de crecimiento de grano, como resultado del marcado descenso del parámetro pre exponencial observado en la **Figura 4.28b**.

Respecto al parámetro pre-exponencial, también llamado coeficiente de crecimiento, la **Figura 4.29** muestra la comparación de los resultados obtenidos por el método FG (a) y de Dioszegi (b), el comportamiento de los datos mostrados por el resultado de la combinación de métodos Fourier-Dioszegi son los únicos que no siguen el patrón de reducción en su valor conforme se incrementa el contenido de soluto, mientras que en proporción los resultados de la combinación Fourier-FG (FFG)son los más similares al comportamiento predicho por el modelo LGK . Esa combinación FFG fue la que generó a través del micro macro modelo, curvas de enfriamiento simuladas más cercanas a las experimentales. Esto puede deberse a que este parámetro refleja mejor el avance de la punta dendrítica.

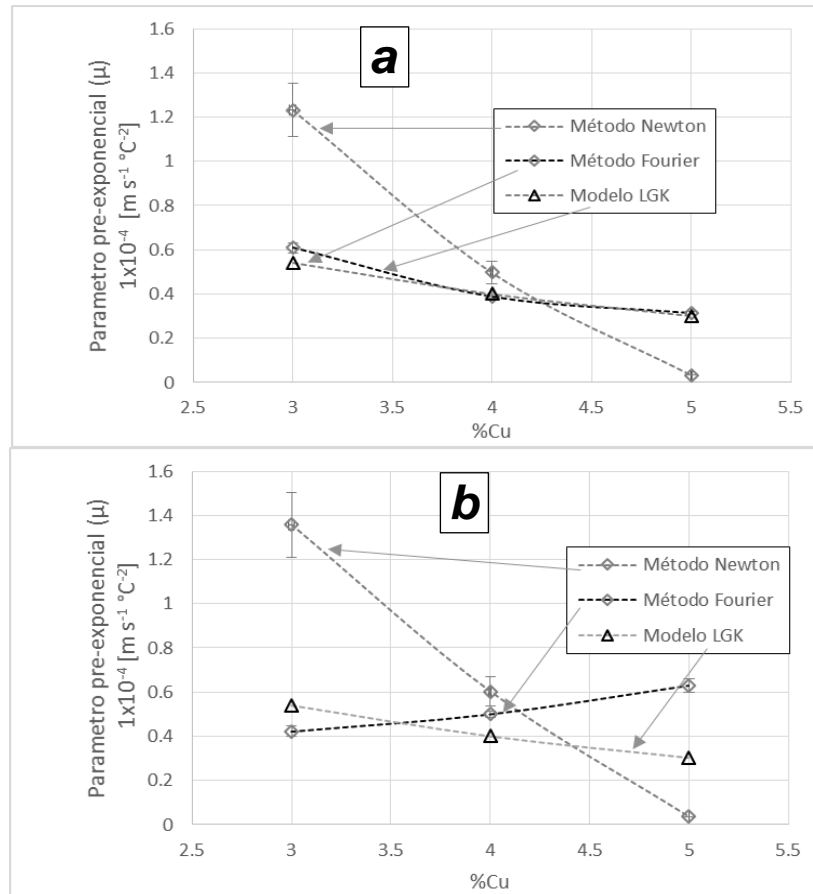


Figura 4.28 Comparación del parámetro pre-exponencial obtenido por los métodos de Newton y Fourier con los análisis FG (a) y Dioszegi (b), respecto al modelo LGK.

Con el propósito de tener una mejor apreciación cuantitativa del efecto del contenido de soluto sobre la cinética de crecimiento de grano en función del subenfriamiento, que tome en su conjunto los efectos de los cambios detectados en los parámetros pre-exponenciales y exponenciales obtenidos por el método FG, Dioszegi con Newton y Fourier y por el modelo LGK, en la **Figura 4.29** se muestra cómo cambia la velocidad de crecimiento con respecto al subenfriamiento. Un análisis rápido de los resultados desplegados en esta figura permite constatar que todos los resultados son cercanos en orden de magnitud.

La **Figura 4.29a** muestra que los resultados obtenidos de la aplicación de los parámetros obtenidos por la combinación de métodos Fourier-Dioszegi muestran una tendencia

contraria en cuanto al efecto del contenido de soluto sobre la rapidez de crecimiento de grano en comparación a las otras combinaciones, ya que predice un incremento en la velocidad de crecimiento conforme aumenta el contenido de soluto, observable en la secuencia de presentación de arriba abajo que es 5% seguido de 4% y 3% de Cu, mientras que en las otras combinaciones es 3% seguido de 4% y en el fondo 5%.

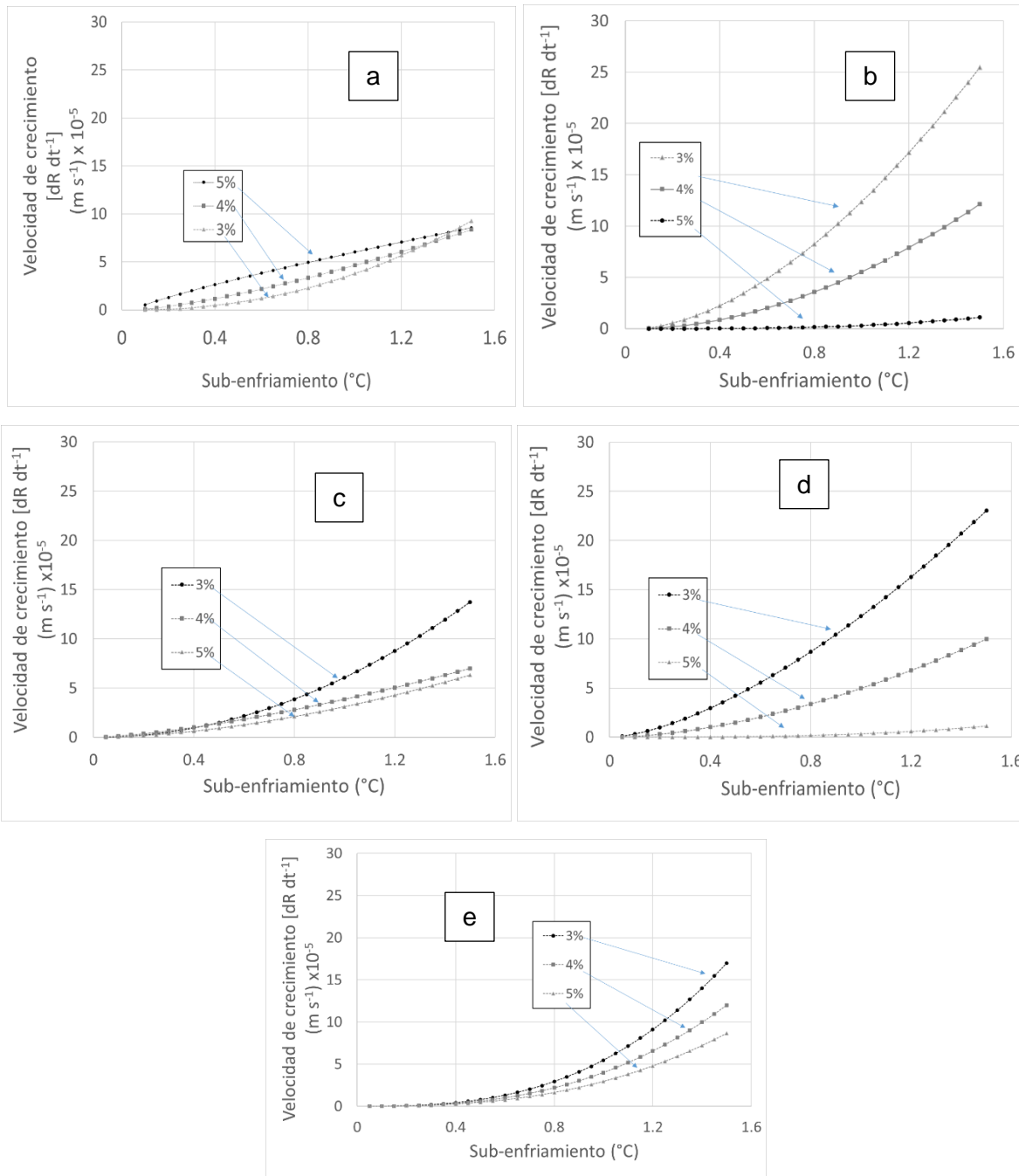


Figura 4.29 Velocidad de crecimiento en función del subenfriamiento, resultado de aplicación de parámetros encontrados con las metodologías: (a) Fourier-Dioszegi, (b) Newton-Dioszegi, (c) Fourier-FG, (d) Newton-FG y (e) LGK.

Las **Figuras 4.29 b** y **4.29 d**, corresponden a la combinación de Newton-Dioszegi y Newton-FG respectivamente, ambas figuras muestran curvas de crecimiento más alejadas entre sí, indicando con esto un mayor efecto del contenido de soluto en el abatimiento de la velocidad de crecimiento de grano conforme se incrementa el contenido de soluto. La **Figura 4.29 c** (Fourier-FG) presenta el mayor acercamiento, tanto en orden como en amplitud a la **Figura 4.29 e** (LGK).

4.2.7 Aplicación del método inverso para obtener el coeficiente global de transporte en aleaciones hipoeutéticas.

Con el fin de establecer la pertinencia de los valores obtenidos para los parámetros de crecimiento calculados por el método FG se procedió a utilizarlos, junto con los datos experimentales de densidad de granos en un modelo implementado en un programa de cómputo para simular las curvas de enfriamiento experimental. Para simular las condiciones de enfriamiento se utilizaron los valores de coeficientes globales de transferencia de calor h_{∞} obtenidos mediante modelado inverso de transferencia de calor aplicado a las curvas de enfriamiento experimentales.

Con el propósito de validar la información de parámetros de crecimiento cinético con un micro macró modelo, se procedió a obtener los valores del coeficiente de transferencias de calor combinado como una función de la temperatura mediante el procedimiento señalado en el **Capítulo 2**, en **Figura 4.30** se presenta dicho comportamiento y en la **tabla 4.7** se presentan los coeficientes de las ecuaciones obtenidas por regresión polinómica.

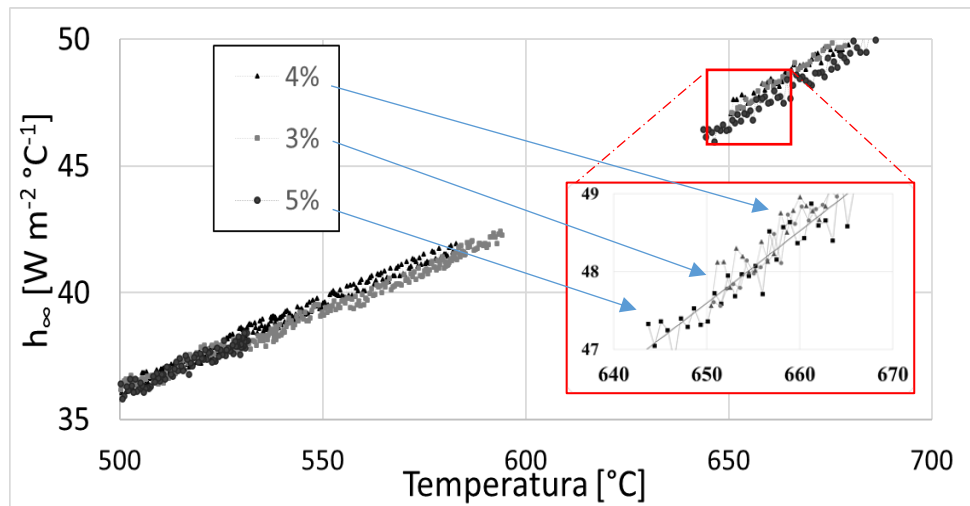


Figura 4.30 Constantes de la ecuación del coeficiente combinado de transporte y correlación polinómica obtenidas del análisis inverso aplicado a la información de las aleaciones hipoeutéticas.

La información obtenida de la densidad de granos, parámetros cinéticos y el coeficiente combinado de transferencia de calor, se agregaron al modelo mecanístico descrito en el **Capítulo 2**, con el fin de validar los parámetros de crecimiento de grano obtenidos en cada caso. También se utilizaron los parámetros de crecimiento de grano calculados empleando el modelo LGK multicomponente, de acuerdo con lo mostrado en el **Capítulo 2**. La

validación se realizó mediante la comparación, en los momentos iniciales de la solidificación, de la curva de enfriamiento simulada empleando parámetros de crecimiento de grano específicos, con la curva de enfriamiento experimental.

Tabla 4.7 Parámetros de la evolución del coeficiente combinado de transporte de calor, obtenidos de la regresión polinómica.

Ecuación:	$h_{\infty} = A_{\infty} + B_{\infty} \exp\left(\frac{T}{C_{\infty}}\right)$			
Porcentaje en peso de cobre	A_{∞} [W m °C ⁻¹]	B_{∞} [W m ⁻² °C ⁻¹]	C_{∞} [°C ⁻¹]	R ²
3%	23.59 ± 0.05	1.89 ± 0.02	256.41 ± 0.87	0.99 ± 0.01
4%	23.61 ± 0.07	1.88 ± 0.03	250.06 ± 1.16	0.99 ± 0.01
5%	22.57 ± 0.07	2.71 ± 0.03	285.71 ± 1.27	0.99 ± 0.01

4.2.8. Validación y comparación de los parámetros obtenidos mediante su aplicación en el micromacro modelo en aleaciones hipoeutécticas.

En la **Figura 4.31** se muestran los resultados de las simulaciones de curvas de enfriamiento en el caso de la aleación Al-3%Cu. En la **Figura 4.31 a** se muestran las curvas simuladas empleando los parámetros de crecimiento de grano obtenidos a partir de las combinaciones de métodos de crecimiento FG y Dioszegi con la fracción sólida obtenida del método de Newton. En esta figura se puede ver que existen notorias discrepancias entre las curvas simuladas con relación a la realidad experimental lo cual sugiere que no es tan recomendable utilizar la metodología de Newton para describir la evolución de la fracción sólida. También se observa que el empleo de los parámetros de crecimiento generados por el modelo LGK tampoco son capaces de proporcionar una buena concordancia entre la curva de enfriamiento simulada y la experimental. En la **Figura 4.31 b** se muestran las curvas simuladas cuando se emplea el método de Fourier en combinación con los métodos FG y Dioszegi. En esta figura se puede observar cómo la concordancia entre curvas simuladas y experimentales es notoriamente mejor, lo cual sugiere que el empleo del método de Fourier con los dos métodos considerados para determinación de parámetros de crecimiento de grano proporciona valores más adecuados de estos parámetros cinéticos. También se observa en esta figura que el método FG proporciona una simulación de la curva de enfriamiento más cercana a la realidad experimental y que el modelo LGK y la combinación Fourier-Dioszegi proporcionan parámetros cinéticos que no permiten capturar el comportamiento térmico experimental de una manera adecuada.

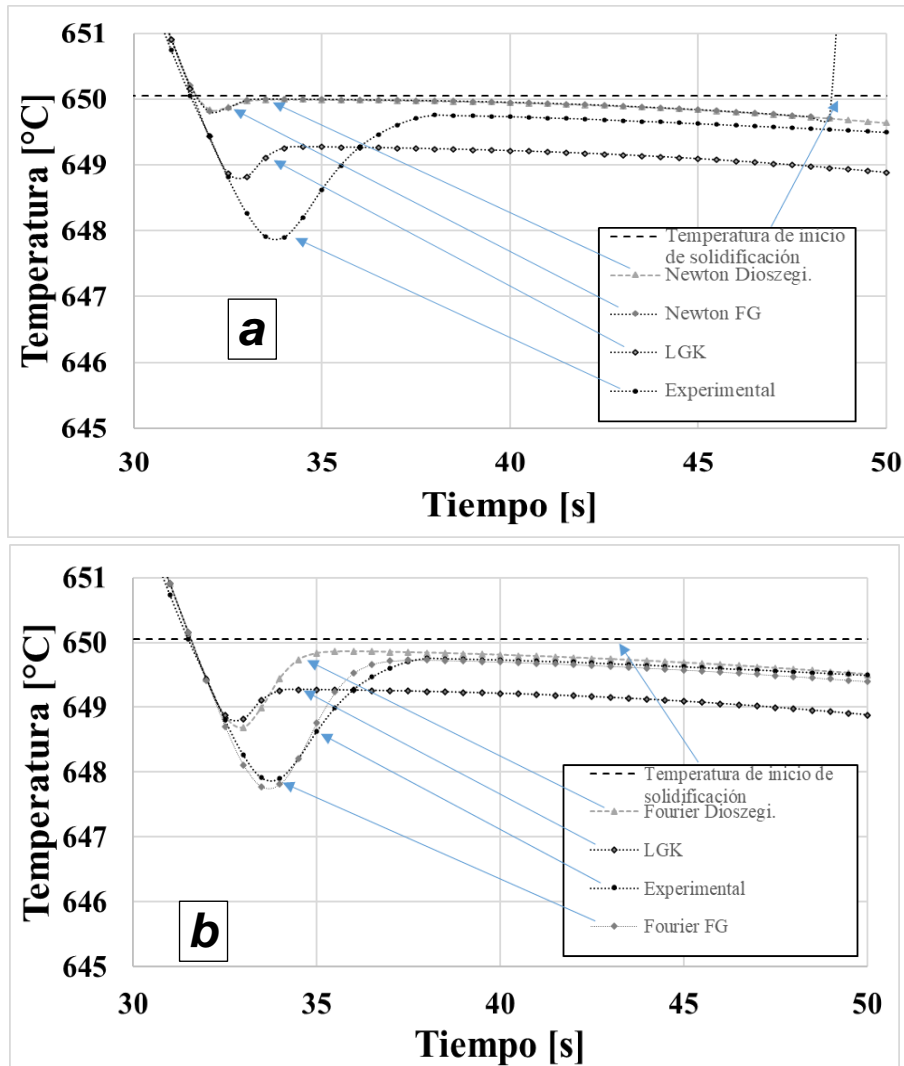


Figura 4.31 Curvas de enfriamiento experimental y simuladas con los parámetros de cinética de crecimiento de grano obtenidos. Newton (a) y Fourier (b). Aleación Aluminio con 3% de cobre.

En la **Figura 4.32** se muestran las curvas de enfriamiento experimental y simuladas, asociadas al empleo del método de Newton (**Figura 4.32 a**) y Fourier (**Figura 4.32 b**) correspondientes al enfriamiento e inicio de solidificación de la aleación Al-4%Cu. En la **Figura 4.32 a** se muestran las curvas simuladas empleando las combinaciones de métodos de crecimiento FG y Dioszegi con la fracción sólida obtenida del método de Newton. Al igual que en el caso de la aleación con 3%Cu, se observa que existen discrepancias, aunque un poco menores en este caso, entre las curvas simuladas con respecto a las experimentales. De hecho, la concordancia lograda por la combinación Newton FG proporciona una concordancia comparable con la lograda por la combinación Fourier Dioszegi. Esto indica nuevamente, que no es del todo recomendable utilizar la metodología de Newton para describir la evolución de la fracción sólida para obtener los parámetros cinéticos de crecimiento de grano, aunque si se combina con el método FG puede proporcionar valores aceptables de parámetros cinéticos. También se confirma que el empleo de los parámetros de crecimiento generados por el modelo LGK no proporciona una concordancia tan buena entre la curva de enfriamiento simulada y la experimental

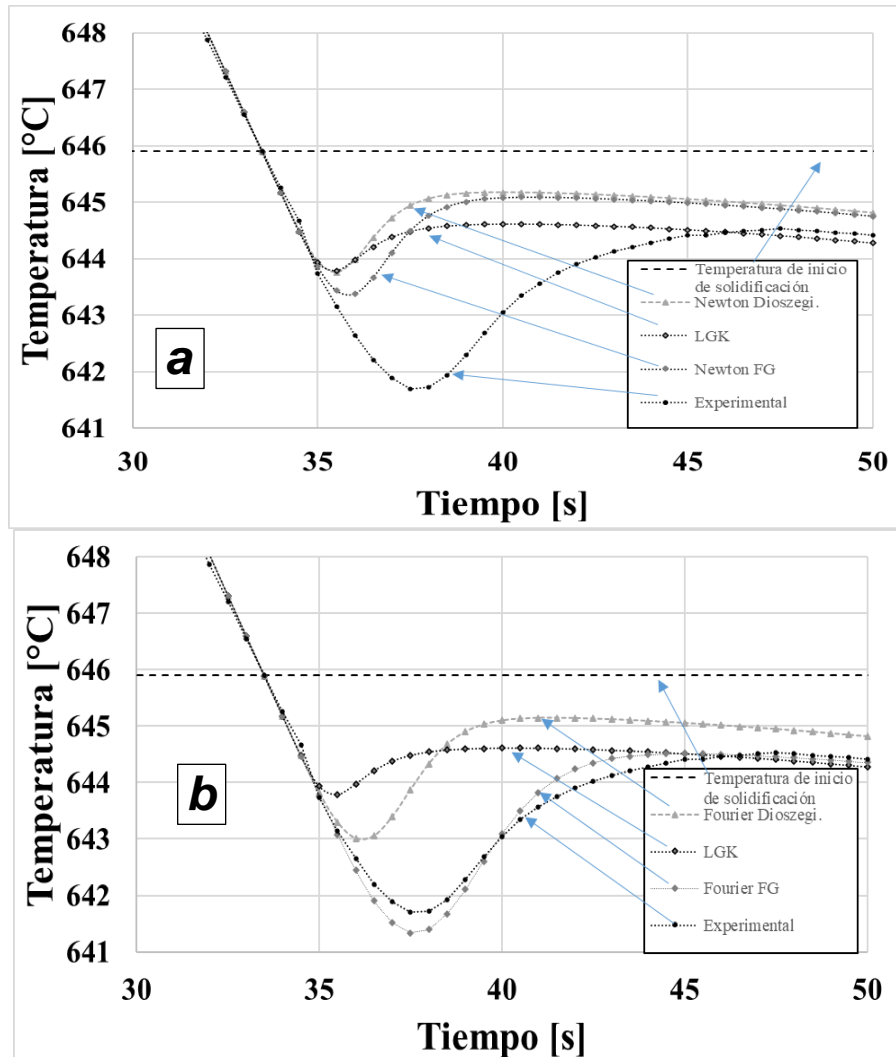


Figura 4.32 Curvas de enfriamiento experimental y simuladas con los parámetros de cinética de crecimiento de grano obtenidos. Newton (a) y Fourier (b). Aleación Aluminio con 4% de cobre.

La **Figura 4.33** corresponde a las curvas de enfriamiento experimental y simuladas, asociadas al empleo del método de Newton (**Figura 4.33 a**) y Fourier (**Figura 4.33 b**) para las aleaciones Al-5%Cu. En este caso se observa que las simulaciones obtenidas por las combinaciones del método de Newton con Dioszegi y con FG proporcionan mejores concordancias con la curva de enfriamiento experimental que las logradas con contenidos menores de soluto y mejores que las logradas empleando el modelo LGK

La **Figura 4.33 b** vuelve a indicar que la mejor concordancia se logra con la combinación Fourier FG y que la combinación Fourier Dioszegi no produce una simulación tan concordante, con un desempeño inferior al logrado por el modelo LGK. Los resultados mostrados en estas figuras sugieren de manera general que el empleo del método de Newton no necesariamente permite la obtención de los mejores valores de coeficientes de crecimiento, aunque cuando es combinado con el método FG muestra un desempeño relativamente aceptable para para simular las curvas de enfriamiento experimental.

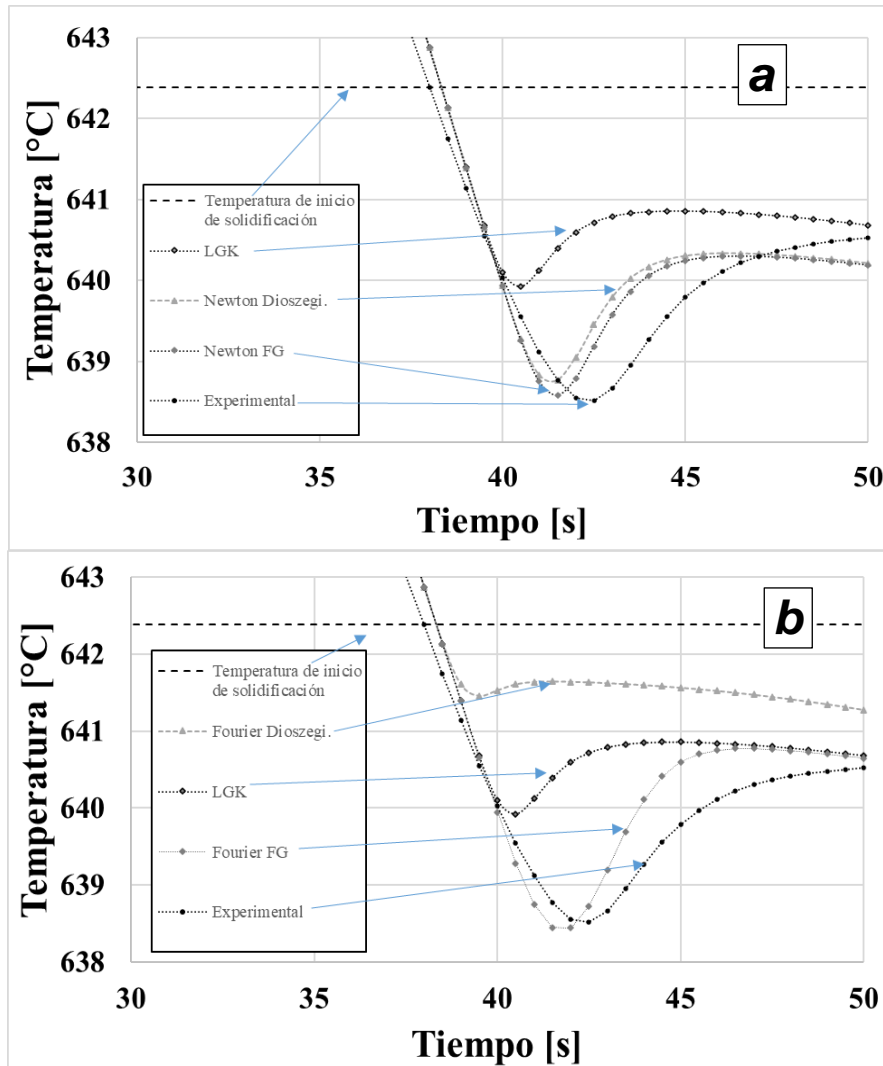


Figura 4.33 Curvas de enfriamiento experimental y simuladas con los parámetros de cinética de crecimiento de grano obtenidos. Newton (A) y Fourier (B). Aleación Aluminio con 5% de cobre.

Los resultados mostrados en las **Figuras 4.31 - 4.33** sugieren así mismo que el método de Fourier proporciona los mejores resultados al combinarse con el método FG ya que en todos los casos se observa que las curvas de enfriamiento simuladas empleando los parámetros de crecimiento de grano determinados mediante el método FG presentan las mejores concordancias con las curvas de enfriamiento experimental. Lo anterior indica que los valores de los parámetros de crecimiento de grano determinados por la combinación del método FG y Fourier en el caso de las aleaciones hipoeutécticas es el más recomendado.

CONCLUSIONES

En este trabajo se desarrolló un nuevo método para determinar los parámetros de crecimiento de grano de aleaciones eutécticas e hipoeutécticas a partir del procesamiento numérico de curvas de enfriamiento experimental y determinaciones metalográficas.

Para validar la pertinencia de los parámetros de crecimiento generados por el método propuesto y compararlo con parámetros de crecimiento obtenidos mediante otros métodos o modelos cinéticos reportados en la literatura, se implementó una metodología y un modelo mecanístico para simular las curvas de enfriamiento experimentales durante la nucleación y el crecimiento de los granos.

El método fue aplicado para determinar los parámetros de crecimiento de grano de aleaciones eutécticas Al-Cu, Al-Si y Al-Ni solidificadas a tres diferentes velocidades de enfriamiento encontrando que el aumento en la velocidad de enfriamiento incrementa la densidad de granos y la velocidad de crecimiento de estos, lo cual se refleja en la curva de enfriamiento con una disminución del subenfriamiento máximo y en un aumento de la temperatura promedio presente en la meseta eutéctica.

Se analizaron los parámetros cinéticos obtenidos por los métodos FG, Dioszegi y Degand, empleando los métodos de Newton y de Fourier para la evolución de la fracción sólida, así como los resultados reportados por Magnin [72], Kaya [123] y Ares [122] para los eutécticos Al-Si, Al-Ni y Al-Cu respectivamente. Los resultados de las simulaciones muestran que el empleo del método FG combinado con una determinación de la fracción sólida empleando el método de Fourier es el que genera curvas de enfriamiento simuladas más cercanas a las curvas de enfriamiento experimental en todos los casos. Los resultados también muestran que la combinación FG-Newton genera parámetros de crecimiento que, al aplicarse en un modelo para simular curvas de enfriamiento, también proporciona simulaciones cercanas a las curvas experimentales.

Los resultados obtenidos por la aplicación del método propuesto a aleaciones hipoeutécticas Al-Cu con tres diferentes contenidos de Cu muestran que el incremento en el contenido de soluto provoca un incremento en la densidad de granos y en la fracción sólida en el punto de coherencia dendrítica, así como una disminución en los valores de los parámetros de crecimiento de grano y en consecuencia una disminución en la velocidad de crecimiento de grano, lo cual junto con el resto de los resultados sugiere un cambio relevante en el número, morfología y velocidad de crecimiento de los granos, asociados al incremento y posible segregación del soluto hacia el líquido remanente.

El orden de magnitud calculado para los parámetros pre exponencial y exponencial de crecimiento de grano por el método propuesto en este trabajo al aplicarse a las aleaciones eutécticas e hipoeutécticas bajo estudio, fue el mismo al obtenido por los otros métodos analizados en este trabajo y a los valores reportados en la literatura, lo que sugiere una cercanía de los resultados generados por el método

FG con lo determinado teóricamente por otros modelos y experimentalmente reportado en la literatura.

Para las aleaciones hipoeutécticas se determinó el punto de coherencia dendrítica, se obtuvieron los parámetros cinéticos aplicando los métodos FG y Dioszegi empleando los métodos de Newton y Fourier para la evolución de la fracción sólida, así como los valores de parámetros cinéticos obtenidos de aplicar el modelo LGK multicomponente. Los resultados de las simulaciones muestran que el empleo del método FG combinado con una determinación de la fracción sólida empleando el método de Fourier es el que genera curvas de enfriamiento simuladas más cercanas a las curvas de enfriamiento experimental en todos los casos.

Los resultados obtenidos de las simulaciones de curva de enfriamiento empleando los parámetros obtenidos mediante el método FG combinado con Fourier y con Newton, con las simulaciones obtenidas empleando los parámetros de crecimiento generado por otros métodos o modelos cinéticos reportados en la literatura sugiere que el método FG es capaz de determinar parámetros de crecimiento que permiten modelar aceptablemente curvas de enfriamiento experimental y con esto la cinética de crecimiento de grano de aleaciones eutécticas e hipoeutécticas.

ABREVIATURAS, SUBÍNDICES, SUPERÍNDICES Y SIMBOLOS

ABREVIATURA	SIGNIFICADO
AM	Manufactura aditiva
CA	Modelo celular automático
CAFE	Acoplamiento de los modelos celular automático y elemento finito
CE	Criterio extremo
CET	Transición columnar-equiaxial.
DAS	Brazos dendríticos secundarios.
DC	Enfriamiento directo
ECR	Proporción de cristales equiaxiados
ESR	Electro-escoria.
FE	Modelo de elemento finito.
F-EMS	Agitación electromagnética final.
GMAW	Soldadura por arco metálico con gas.
GTAW	Soldadura por arco de tungsteno.
JH	Jackson-Hunt
KGT	Modelo Kurz-Giovanola-Trivedi
LGK	Modelo Lipton-Glicksman-Kurz
MC	Modelo Montecarlo.
M-EMS	Agitación electromagnética en el molde
PCD	Punto de coherencia dendrítico
PFM	Modelo de perfil de fase
S/L	Interfaz sólido-líquido.
SDAS	Espaciamiento dendrítico secundario
TA	Análisis térmico
TC	Termopar central

NOMBRE	SUBÍNDICES Y SUPERÍNDICES
Área	<i>A</i>
Calculado	<i>calc</i>
Concentración	<i>c</i>
Crecimiento límite máximo	<i>cr</i>
Crecimiento límite mínimo	<i>as</i>
Equilibrio	<i>eq</i>
Experimental	<i>exp</i>
Exterior	<i>ext</i>
Extendido	<i>ex</i>
Fase alpha	α
Fase beta	β
Final	<i>fin</i>
Global	<i>glob</i>
Identificadores	<i>i, j</i>
Inicio	<i>ini</i>
Líquido	<i>l</i>
Máximo	<i>max</i>
Microconstituyente eutéctico	<i>e</i>
Mínimo	<i>min</i>
Núcleos	<i>n</i>
Paso de tiempo	<i>temp</i>
Referencia	<i>ref</i>
Radio	<i>r</i>
Ramificación	<i>br</i>
Sólido	<i>s</i>
Tiempo	<i>t</i>
Volumen	<i>v</i>

NOMBRE	SIMBOLO	UNIDADES	NOMBRE	SIMBOLO	UNIDADES
Angulo interfacial	θ	Angulo de contacto	Segundo coeficiente de corrección de Microsolubilidad	B_2	$^{\circ}C^{-1}$
Área	A	m^2	Tercer coeficiente de corrección de Microsolubilidad	B_3	$m^2 s^{-1}$
Área de referencia	A_{ref}	m^2	Radio mínimo	R_{min}	m
Calor instantáneo generado durante la solidificación	Q	W	Concentración del soluto	C	% soluto
Capa limite	d_0	m	Concentración de líquido remanente	C_L^*	% soluto
Capacidad calorífica a presión constante	C_p	$J kg^{-1} ^{\circ}C^{-1}$	Concentración del soluto al inicio de la solidificación.	C_o	% soluto
Capacidad calorífica a volumen constate	C_v	$J kg^{-1} ^{\circ}C^{-1}$	Conductividad térmica	K	$W m^{-1} ^{\circ}C^{-1}$
Coefficiente combinado de extracción de calor.	h_{∞}	$W m^{-2}$	Curva cero de Fourier	Z_F	---
Primer parámetro del coeficiente combinado de transporte de calor.	A_{∞}	$W m^{-2}$	Curva cero de Newton	Z_N	---
Segundo parámetro del coeficiente combinado de transporte de calor.	B_{∞}	$W m^{-2}$	Diámetro de granos promedio	$T.G.$	m
Tercer parámetro del coeficiente combinado de transporte de calor.	C_{∞}	$^{\circ}C^{-1}$	Diferencia de concentración	ΔC	% soluto
Coefficiente de correlación	R	----	Energía interfacial	σ	$N m^{-1}$
Coefficiente de corrección de eutécticos irregulares	Φ	---	Entalpia	H	$J kg^{-1}$
	B		Entalpia de fusión	ΔH_f	$J kg^{-1}$
Coefficiente de difusión	D	$m^2 s^{-1}$	Espacio entre brazos dendríticos secundarios.	λ_2	m
Coefficiente de distribución térmica	α	$m s^{-1}$	Espacio interlaminar	λ	m
Coefficiente de reparto de soluto	k	---	Número de granos que interceptaban el perímetro del área analizada	n_2	# granos
Coefficiente de reparto de soluto al inicio de la solidificación	k_0	---	Numero de granos que se ubicaban por completo dentro del círculo de referencia	n_1	# granos
Coefficiente de reparto equivalente	k_{eq}	---	Numero de Ivanstov	Iv	---
Coefficiente exponencial de crecimiento	η	---	Numero de núcleos	N	# núcleos sólidos
Coefficiente exponencial de nucleación	n	---	Numero de núcleos al final de la nucleación	N_s	# núcleos
Coefficiente Gibbs-Thomson	Γ	$m ^{\circ}C$	Numero de núcleos al inicio de la nucleación	N_i	# de núcleos
Coefficiente pre-exponencial de crecimiento	μ	$m s^{-1} ^{\circ}C^{-n}$	Numero de Péclet de soluto.	P_c	---
Coefficiente pre-exponencial de nucleación	ψ	$m s^{-1} ^{\circ}C^{-n}$	Numero de Péclet térmico	P_T	---
Primer coeficiente de corrección de Microsolubilidad	B_1	$^{\circ}C m^{-1}$	Número total de granos en el área de referencia	N_l	# granos

NOMBRE	SIMBOLO	UNIDADES	NOMBRE	SIMBOLO	UNIDADES
Números de núcleos por unidad de volumen.	N_v	# núcleos m ⁻³	Subenfriamiento por gradientes térmicos.	ΔT_T	°C
Parámetro de ajuste	n_1, n_2, K_1	Parámetros de ajuste de nucleación de Oldfield.	Temperatura de fusión	T_f	°C
Parámetro de ajuste de crecimiento eutéctico irregular en el modelo de Jackson y Hunt	Φ	---	Temperatura de nucleación.	T_N	°C
Parámetro de ajuste de la función de Ivanstov	E_1	---	Temperatura de solidificación	T_m	°C
Parámetro de ajuste de nucleación de Maxwell	μ_2	m s ⁻¹ °C ⁻ⁿ	Temperatura de transformación de fase	T_e	°C
Parámetro de ajuste de nucleación de Stefanescu.	μ_3	m s ⁻¹ °C ⁻ⁿ	Temperatura en la punta dendrítica	T_{TIP}	°C
Parámetro de pre-exponencial de crecimiento respecto al gradiente de composición.	μ_c	m s ⁻¹ °C ⁻ⁿ	Temperatura en el fluido de enfriamiento	T_∞	°C
Parámetro pre-exponencial de crecimiento respecto a la curvatura.	μ_r	m s ⁻¹ °C ⁻ⁿ	Temperatura en el seno del fluido	T_{seno}	°C
Pendiente de la línea liquidus respecto al soluto	m	°C %soluto ⁻¹	Temperatura local	T_p	°C
Radio	r	m	Tiempo	t	s
Radio de final	R_f	m	Tiempo cuando se presenta el 74% de la fracción sólida.	$t_{0,74}$	s
Radio de grano	R	m	Tiempo de inicio de solidificación	t_{ini}	s
Radio de la esfera equivalente	R^e	m	Tiempo donde se presenta el 99.99% de sólido.	t_{fin}	s
Radio de las puntas dendríticas	R_g	m	Tiempo donde se presenta el máximo subenfriamiento.	t_{min}	s
Radio de sólido equivalente	R_s	m	Tiempo donde se presenta el punto de coherencia dendrítico	t_{PCD}	s
Radio máximo	R_{max}	m	Tiempo donde se presenta la máxima recalescencia	t_{max}	s
Rapidez de crecimiento de grano	V	m s ⁻¹	Vector naba	∇	---
Subenfriamiento	ΔT	°C	Velocidad de avance de la punta dendrítica	v	m s ⁻¹
Subenfriamiento durante la nucleación	ΔT_N	°C	Velocidad de crecimiento de la esfera aparente	v_{env}^e	m s ⁻¹
Subenfriamiento en el frente columnar	ΔT_{col}	°C	Velocidad de crecimiento	V	m s ⁻¹
Subenfriamiento extremo	ΔT_{ex}	°C	Velocidad de crecimiento de la punta dendrítica	v_{tip}^c	m s ⁻¹
Subenfriamiento por curvatura	ΔT_r	°C	Velocidad de enfriamiento	$\dot{T}, \frac{dT}{dt}$	°C s ⁻¹
Subenfriamiento por energía interfacial	ΔT_σ	°C	volumen	V	m ⁻³
Subenfriamiento por gradiente de concentración.	ΔT_c	°C			

ÍNDICE DE FIGURAS

Figura 1.1 Escalas de longitud para la simulación de la solidificación [6].	- 5 -
Figura 1.2 Crecimiento dendrítico equiaxial, a) obtenido por CA y b) obtenido experimentalmente, Aleación Al-Mg 5% [11].	- 6 -
Figura 1.3 Policristales de dendritas equiaxiales obtenidas por cálculo PF en 3D [34].	- 8 -
Figura 1.4 Microestructura de Sn-3Pb enfriada por el lado derecho; a) metalografía, b) simulación obtenida con el método CAFE 3D. Tamaño 100x60x10 mm. [37].	- 9 -
Figura 1.5 Esquema y evolución densidad de núcleos contra subenfriamiento de los tipos de nucleación [1].	- 14 -
Figura 1.6 Influencia de la composición, gradiente térmico y velocidad de crecimiento sobre la morfología [1].	- 14 -
Figura 1.7 Esquema de la relación de temperatura, posición y tipo de grano durante la solidificación [64].	- 15 -
Figura 1.8 Mapa de estructuras obtenidas de la solidificación. Los esquemas muestran la estructura de grano resultante [66].	- 16 -
Figura 1.9 Microestructuras de eutécticos, (a) regulares [68] y (b) irregulares [69].	- 18 -
Figura 1.10 Esquema del subenfriamiento en función del espacio interlaminar, respecto al subenfriamiento constitucional y de curvatura [1].	- 19 -
Figura 1.11 Ajuste de espaciado para el caso convergente de láminas α [71].	- 19 -
Figura 1.12 Ejemplo del grafico implementado en el método de Dioszegi [74].	- 21 -
Figura 1.13 Esquema de que muestra la esfera y la dendrita equivalente [29].	- 24 -
Figura 1.14 Punta de la dendrita con la estimación de la esfera truncada. Zona de análisis estimando esfera truncada, r es el tamaño de la dendrita y λ_2 es la distancia entre las puntas dendríticas [96].	- 24 -
Figura 1.15 Estimaciones geométricas y de concentración, del modelo de punta en forma de esfera truncada.	- 25 -
Figura 1.16 Velocidad de crecimiento correlacionada con el radio de la punta dendrítica-	27 -
Figura 2.1 Representación de una curva típica de una transformación de fase y su derivada respecto al tiempo, se representa el tiempo de máximo subenfriamiento, el tiempo de máxima recalcencia, tanto inicio y fin de la solidificación.	
-	- 32 -
Figura 2.2 Representación de la densidad de núcleos en un espacio cubico y el volumen del grano equiaxial esférico.	- 32 -
Figura 2.3 Ejemplo del grafico del log (dR/dt) en función del log (ΔT).	- 33 -
Figura 2.4 Curva de enfriamiento (AlSi9Cu4) obtenida del termopar central (TC) trazado como función de tiempo. La primer, segunda derivada y la línea base se calcularon según Kierkus y Sokolowski. [113].	- 36 -
Figura 2.5 Curvas de tiempo y temperatura superpuestas dT/dt representan los datos del termopar TC que corresponde a la curva de enfriamiento de la Figura. 2.4 [107].	- 37 -
Figura 2.6 “Acercamiento al punto de coherencia dendrítica para determinar las características usando el gradiente térmico y la primera derivada de la temperatura respecto al tiempo, que proviene de la curva de la Figura 2.5.	- 37 -
Figura 2.7 Ejemplo de aplicación sobre una muestra de Al-Cu 3%. Elaboración propia-	38 -
Figura 2.8 Representación de una curva típica de una transformación de fase y su derivada respecto al tiempo, se representa el tiempo de inicio de solidificación, el tiempo que se presenta el PCD, tanto inicio y fin de la solidificación.	
-	- 39 -
Figura 2.9 A) Grafico de la curva de enfriamiento, B) primera derivada de la temperatura en función del tiempo, C) curva cero de Newton y D) curva cero de Fourier.	- 41 -
Figura 2.10 Sistema de bajo estudio para el cálculo de la transferencia de calor.	- 43 -

Figura 2.11 Discretización de la geometría de la muestra usada para el cálculo de la transferencia de calor.	- 44 -
Figura 2.12 Esquema de la discretización del sistema.	- 45 -
Figura 2.13 Representación de los parámetros del nodo central.	- 47 -
Figura 2.14 Representación de los parámetros de los nodos encontrados en el seno del metal.	- 48 -
Figura 2.15 Representación de los parámetros del nodo de la interfaz metal/molde. ...	- 48 -
Figura 2.16 Etapas de enfriamiento y transformación de una curva típica de tipo eutéctica.	- 49 -
Figura 2.17 Etapas de enfriamiento y transformación de una curva típica de enfriamiento y solidificación de una aleación hipoeutéctica.	- 52 -
Figura 2.18 Representación esquemática del diagrama de fases asociado al sistema Al-X, en donde se muestran los parámetros que caracterizan a la ruta de solidificación al equilibrio de una aleación hipoeutéctica de una composición dada.	- 53 -
Figura 2.19 Representación esquemática de los radios característicos y el reparto de soluto durante el crecimiento dendrítico.	- 55 -
Figura 2.20 Diagrama temperatura contra composición de Al-Si [121].	- 60 -
Figura 2.21 Diagrama temperatura contra composición de Al-Cu. [121].	- 60 -
Figura 2.22 Diagrama temperatura contra composición de Al-Ni. [121].	- 60 -
Figura 2.23 Velocidad de avance de la punta dendrítica, V , en función del subenfriamiento, Al-Cu hipoeutéctica con la composición de la tabla 2.4.	- 62 -
Figura 2.24 Algoritmo de cálculo para la aplicación del modelo inverso de obtención del coeficiente global de transporte.	- 64 -
Figura 2.25 Coeficiente convectivo h en función de la temperatura obtenido de un programa previo conocido.	- 65 -
Figura 2.26 Coeficiente convectivo h en función de la temperatura obtenido del programa donde se aplica el método inverso.	- 65 -
Figura 2.27 Curvas experimentales y simuladas con el modelado inverso, enfriamiento con un flujo de aire 100 L/ min, a) aluminio cobre de composición eutéctica, b) aluminio con la estimación de 4% de cobre.	- 66 -
Figura 3.1 a) Esquema del dispositivo, b) Dispositivo antes de emplearse (se agregaron agujeros de salida en la tapa) y c) corte del esquema.	- 68 -
Figura 3.2 a) Esquema de la cámara de enfriamiento del dispositivo, b) Cámara de enfriamiento del dispositivo empleado.	- 68 -
Figura 3.3 Curvas de enfriamiento obtenidas experimentalmente de tres muestras del eutéctico Al-Ni enfriadas a 100 L min ⁻¹	- 69 -
Figura 3.4 Curvas de enfriamiento obtenidas experimentalmente de la aleación eutéctica Al-Ni, enfriadas con 3 flujos de aires diferentes (75, 100, y 150 L min ⁻¹).	- 70 -
Figura 3.5 Diagrama de procedimiento.	- 71 -
Figura 3.6 Ejemplos de macroestructuras de a) Aluminio silicio eutéctico, b) Aluminio cobre eutéctico, c) Aluminio-níquel eutéctico, d) Aluminio 3% cobre Cu 3, e) Aluminio 4% cobre y f) Aluminio 5% cobre.	- 72 -
Figura 3.7 Ejemplo de trazado de área de referencia para conteo de granos para la aleación eutéctica Al-Cu.	- 73 -
Figura 3.8 Curvas de enfriamiento en el centro y en la orilla de las aleaciones señaladas, aleación aluminio con 4% de cobre (a) y aleación aluminio níquel de composición eutéctica (b).	- 75 -
Figura 3.9 Primeras derivadas de las curvas de enfriamiento en el centro junto con los tiempos de inicio de solidificación t_{ini} y de fin de solidificación t_{fin} indicados sobre la figura para las aleaciones señaladas, aleación aluminio con 4% de cobre (a) y aleación aluminio níquel de composición eutéctica (b).	- 75 -

Figura 3.10 a y b Muestra las primeras derivadas de las curvas de enfriamiento en el centro junto con las curvas cero de Newton para la aleación hipoeutéctica y la cero de Fourier para el eutéctico Al-Ni y pintado de rojo el área entre las curvas.	- 76 -
Figura 3.11 Primeras derivadas de las curvas de enfriamiento en el centro junto con las curvas cero de Newton y de Fourier para el eutéctico Al-Cu 4% y pintado de rojo el área entre las curvas de primera derivada y curva cero desde el tiempo de inicio de solidificación.	- 76 -
Figura 3.12 Gráficas de evolución de fracción sólida de la aleación hipoeutéctica Al-Cu 4% (a) y para el eutéctico Al-Ni (b).	- 76 -
Figura 3.13 Primera derivada y evolución de la fracción sólida de Newton y Fourier respecto la temperatura de la aleación Al-Cu 4% determinando el PCD.	- 77 -
Figura 3.14 Gráficos de las curvas de enfriamiento de la aleación Al-Cu 4% (a) y Al-Cu de composición eutéctica (b), se indica el tiempo rango de datos evaluados.....	- 78 -
Figura 3.15 Gráficos de las cinéticas Newton y Fourier de la aleación Al-Cu 4%, procesadas con el método de Dioszegi (a) y FG (b).....	- 78 -
Figura 3.16 Gráficos de resultados de la aplicación de los métodos de crecimiento equiaxial eutéctico de la aleación Al Ni enfriado con 100 Litros por minuto de aire dado por los métodos de Fourier y Newton. a) FG, b) Dioszegi, y c) Degand.	- 79 -
Figura 4.1 Curvas de enfriamiento de la aleación Al-Si con diferente flujo de aire de ingreso al dispositivo. (a) Curva con límite en la isoterma 400°C y 600 s, (b)acercamiento de (a)-	81 -
Figura 4.2 Curvas de enfriamiento de la aleación Al- Cu con diferente flujo de aire de ingreso al dispositivo.....	- 82 -
Figura 4.3 Curvas de enfriamiento de la aleación Al- Ni con diferente flujo de aire de ingreso al dispositivo.	- 82 -
Figura 4.4 Fracción sólida en función del tiempo obtenida de la aplicación de método de Newton (a) y Fourier (b) a las curvas de enfriamiento obtenidas a diferente flujo de aire, para la aleación Al-Cu.....	- 83 -
Figura 4.5 Macroestructuras obtenidas de la aleación Al-Cu 33, con a) 75 L/ min, b) 100 L/min y c)150 L/min.....	- 84 -
Figura 4.6 Gráfico de la variación de densidad de grano de los tres sistemas respecto a la velocidad de enfriamiento.	- 85 -
Figura 4.7 Gráfico de análisis cinético de Dioszegi en la aleación eutéctica Al-Cu enfriado con 150 litros por minutos de aire aplicado.	- 86 -
Figura 4.8 Gráficos de los datos experimentales de la aleación Al-Cu enfriada con 150 litros por minuto de aire y resultados de simulación con los datos cinéticos de Dioszegi con la evolución de la fracción sólida de Newton y Fourier, a) coeficientes obtenidos de la evaluación de Dioszegi original y b) aplicación de los coeficientes con Dioszegi modificado.	- 87 -
Figura 4.9 Gráficos de resultados de la aplicación de los métodos de crecimiento equiaxial eutéctico de la aleación Al Cu 33 enfriado con 75 Litros por minuto de aire dado por el método de Fourier. a) FG, b) Dioszegi y c) Degand.....	- 88 -
Figura 4.10 Gráficos de resultados de la aplicación de los métodos de crecimiento equiaxial eutéctico de la aleación Al Cu 33 enfriado con 100 Litros por minuto de aire dado por los métodos de Fourier y Newton. a) FG, b) Dioszegi, y c) Degand.	- 89 -
Figura 4.11 Gráficos de resultados de la aplicación de los métodos de crecimiento equiaxial eutéctico de la aleación Al Cu 33 enfriado con 150 Litros por minuto de aire dado por los métodos de Fourier y Newton. a) FG, b) Dioszegi, y c) Degand.	- 90 -
Figura 4.12 Parámetro exponencial obtenido de la combinación Fourier-FG respecto a la velocidad de enfriamiento mostrando las tres aleaciones de composición eutéctica estudiadas.	- 92 -

Figura 4.13 Coeficiente pre-exponencial en función de la velocidad de enfriamiento para las tres aleaciones	- 93 -
Figura 4.14 Grafica de variación de los coeficientes pre-exponenciales de las aleaciones Al-Si (a), Al-Cu (b) y Al-Ni (c) comparado con la literatura.	- 94 -
Figura 4.15 Coeficiente combinado de extracción de calor en función de la temperatura, obtenido de la aplicación de un flujo de (a)150, (b)100 y (c) 75 litros por minuto, para las aleaciones eutécticas base aluminio con níquel, cobre y silicio.	- 95 -
Figura 4.16 Curvas obtenidas por la simulación con los parámetros obtenidos con las combinaciones de métodos Newton (a) y Fourier (b) con FG, Degand y Dioszegi. Aleación Al-Ni eutéctica con un flujo de 150 litros.	- 97 -
Figura 4.17 Curvas obtenidas por la simulación con los parámetros obtenidos con las combinaciones de métodos Newton (a) y Fourier (b) con FG, Degand y Dioszegi. Aleación Al-Si eutéctica con un flujo de 100 litros.....	- 99 -
Figura 4.18 Curvas obtenidas por la simulación con los parámetros obtenidos con las combinaciones de métodos Newton (a) y Fourier (b) con FG, Degand y Dioszegi. Aleación Al-Cu eutéctica con un flujo de 75 litros por minuto.	- 100 -
Figura 4.19 Curvas de enfriamiento durante la solidificación de las aleaciones hipoeutécticas aluminio con 3, 4 y 5% de cobre. En (b) se muestra un acercamiento a la zona de inicio de solidificación. Se muestran: t_i es el tiempo de inicio de solidificación de la aleación Al- 4%Cu.	- 102 -
Figura 4.20 Evolución de la fracción sólida obtenida por los métodos de Newton y Fourier de la aleación aluminio con 4 % de cobre.	- 103 -
Figura 4.21 Primera derivada de la temperatura respecto al tiempo de la curva de enfriamiento de aluminio cobre al 4% y gradiente térmico de la misma muestra en función de la temperatura, se muestra en rojo el punto considerado de coherencia dendrítica-	104 -
Figura 4.22 Primera derivada de la temperatura respecto al tiempo de la curva de enfriamiento de aluminio cobre al 4% y la evolución de la fracción sólida obtenida por los métodos Newton y Fourier en función de la temperatura, se muestra en rojo el punto considerado de coherencia dendrítica, en azul la coherencia dendrítica obtenida por el método de Newton y obtenida por el método de Fourier.	- 105 -
Figura 4.23 Fracción sólida correspondiente a la coherencia dendrítica en función de la composición, obtenidos por los métodos de Newton y Fourier.....	- 105 -
Figura 4.24 Macroestructuras obtenidas de la aleación hipoeutécticas aluminio cobre con a) 3% de cobre, b) 4% cobre y c) 5% cobre.	- 106 -
Figura 4.25 Densidad de granos en función de la composición de las aleaciones hipoeutécticas aluminio cobre.	- 106 -
Figura 4.26 Logaritmo de la velocidad de crecimiento del radio de grano versus el logaritmo del subenfriamiento, obtenidos de los métodos de Newton (con Dioszegi “a” y FG “b”) y Fourier (con Dioszegi “c” y FG “d”).	- 107 -
Figura 4.27 Comparación del parámetro exponencial obtenido por los métodos de Newton y Fourier con los análisis FG (a) y Dioszegi (b), respecto al modelo LGK.	- 109 -
Figura 4.28 Comparación del parámetro pre-exponencial obtenido por los métodos de Newton y Fourier con los análisis FG (a) y Dioszegi (b), respecto al modelo LGK.	- 110 -
Figura 4.29 Velocidad de crecimiento en función del subenfriamiento, resultado de aplicación de parámetros encontrados con las metodologías: (a) Fourier-Dioszegi, (b) Newton-Dioszegi, (c) Fourier-FG, (d) Newton-FG y (e) LGK.	- 111 -
Figura 4.30 Constantes de la ecuación del coeficiente combinado de transporte y correlación polinómica obtenidas del análisis inverso aplicado a la información de las aleaciones hipoeutécticas.	- 112 -

Figura 4.31 Curvas de enfriamiento experimental y simuladas con los parámetros de cinética de crecimiento de grano obtenidos. Newton (a) y Fourier (b). Aleación Aluminio con 3% de cobre.	- 114 -
Figura 4.32 Curvas de enfriamiento experimental y simuladas con los parámetros de cinética de crecimiento de grano obtenidos. Newton (a) y Fourier (b). Aleación Aluminio con 4% de cobre.	- 115 -
Figura 4.33 Curvas de enfriamiento experimental y simuladas con los parámetros de cinética de crecimiento de grano obtenidos. Newton (A) y Fourier (B). Aleación Aluminio con 5% de cobre.	- 116 -
Figura A1.1 Esquema de cambio de energía libre respecto a la temperatura al estimar una partícula esférica.	- 141 -
Figura A1.2 Esquema de la distribución térmica respecto a la posición, correlacionada con la entalpía y capacidad calorífica del sistema.	- 142 -
Figura A1.3 Esquema de la distribución la temperatura respecto a la composición, mostrándolos cambios de fase.	- 142 -
Figura A1.4 Esquema del cambio de concentración respecto al tiempo en función de la temperatura, en el caso de no encontrar el equilibrio entre el cambio de solidificación y fusión.	- 143 -
Figura A2.1 Representación isométrica de la distribución de nodos. ¡Error! Marcador no definido.	
Figura A2.2 Representaciones bidimensionales de la distribución de nodos.	- 145 -
Figura A2.3 Representación de transferencia en el nodo adiabático.	- 146 -
Figura A2.4 Representación de transferencia en el nodo en el seno del metal.	- 147 -
Figura A2.5 Representación de transferencia en el nodo convectivo.	- 149 -
Figura A3.1. Resultado de la composición química del baño líquido de la aleación Aluminio silicio.	- 152 -
Figura A3.2. Resultado de la composición química del baño líquido de la aleación Aluminio cobre.	- 152 -
Figura A3.3. Resultado de la composición química del baño líquido de la aleación Aluminio níquel.	- 153 -
Figura A3.4. Resultado de la composición química del baño líquido de la aleación Aluminio cobre 3%.	- 153 -
Figura A3.5. Resultado de la composición química del baño líquido de la aleación Aluminio cobre 4%.	- 154 -
Figura A3.6. Resultado de la composición química del baño líquido de la aleación Aluminio cobre 5%.	- 154 -
Figura A6.1. Fracción sólida en función del tiempo obtenida de la aplicación de método de Newton (A) y Fourier (B) en las curvas de enfriamiento a diferente flujo de aire, en la aleación Al-Si.	- 161 -
Figura A6.2. Fracción sólida en función del tiempo obtenida de la aplicación de método de Newton (A) y Fourier (B) en las curvas de enfriamiento a diferente flujo de aire, en la aleación Al-Ni.	- 167 -

- Figura A6.3.** Fracción sólida en función del tiempo obtenida de la aplicación de método de Newton (a) y Fourier (b) a las curvas de enfriamiento obtenidas a diferente flujo de aire, para la aleación Al-Cu..... - 161 -
- Figura A6.4.** Fracción sólida en función del tiempo obtenida de la aplicación de método de Newton y Fourier en las curvas de enfriamiento con la aleación Al-Cu 3%..... - 162 -
- Figura A6.5.** Evolución de la fracción sólida obtenida por los métodos de Newton y Fourier de la aleación aluminio con 4 % de cobre..... - 162 -
- Figura A6.6.** Fracción sólida en función del tiempo obtenida de la aplicación de método de Newton y Fourier en las curvas de enfriamiento con la aleación Al-Cu 5%..... - 162 -
- Figura A7.1.** Primera derivada de la temperatura respecto al tiempo de la curva de enfriamiento de aluminio cobre al 3% y la evolución de la fracción sólida obtenida por los métodos Newton y Fourier en función de la temperatura, se muestra el rojo el punto considerado de coherencia dendrítica, en azul la coherencia dendrítica obtenida por el método de Newton y en obtenida por el método de Fourier..... - 163 -
- Figura A7.2.** Primera derivada de la temperatura respecto al tiempo de la curva de enfriamiento de aluminio cobre al 4% y la evolución de la fracción sólida obtenida por los métodos Newton y Fourier en función de la temperatura, se muestra el rojo el punto considerado de coherencia dendrítica, en azul la coherencia dendrítica obtenida por el método de Newton y en obtenida por el método de Fourier..... - 163 -
- Figura A7.3.** Primera derivada de la temperatura respecto al tiempo de la curva de enfriamiento de aluminio cobre al 5% y la evolución de la fracción sólida obtenida por los métodos Newton y Fourier en función de la temperatura, se muestra el rojo el punto considerado de coherencia dendrítica, en azul la coherencia dendrítica obtenida por el método de Newton y en obtenida por el método de Fourier..... - 163 -
- Figura A8.1.** Gráficos de resultados de la aplicación de los métodos de crecimiento equiaxial eutéctico de la aleación Al Si enfriado con 75 Litros por minuto de aire dado por los métodos de Fourier y Newton. a) FG, b) Dioszegi, y c) Degand..... - 165 -
- Figura A8.2.** Gráficos de resultados de la aplicación de los métodos de crecimiento equiaxial eutéctico de la aleación Al Si enfriado con 100 Litros por minuto de aire dado por los métodos de Fourier y Newton. A) FG, B) Dioszegi, y C) Degand..... - 165 -
- Figura A8.3.** Gráficos de resultados de la aplicación de los métodos de crecimiento equiaxial eutéctico de la aleación Al Si enfriado con 150 Litros por minuto de aire dado por los métodos de Fourier y Newton. a) FG, b) Dioszegi, y c) Degand..... - 166 -
- Figura A8.4.** Gráficos de resultados de la aplicación de los métodos de crecimiento equiaxial eutéctico de la aleación Al Ni enfriado con 75 Litros por minuto de aire dado por los métodos de Fourier y Newton. A) FG, B) Dioszegi, y C) Degand..... - 166 -
- Figura A8.5.** Gráficos de resultados de la aplicación de los métodos de crecimiento equiaxial eutéctico de la aleación Al Ni enfriado con 100 Litros por minuto de aire dado por los métodos de Fourier y Newton. A) Crecimiento libre, B) Dioszegi, y C) Degand..... - 167 -
- Figura A8.6.** Gráficos de resultados de la aplicación de los métodos de crecimiento equiaxial eutéctico de la aleación Al Ni enfriado con 150 Litros por minuto de aire dado por los métodos de Fourier y Newton. a) FG, b) Dioszegi, y c) Degand..... - 167 -

Figura A8.7. Gráficos de resultados de la aplicación de los métodos de crecimiento equiaxial eutéctico de la aleación Al Cu 33 enfriado con 75 Litros por minuto de aire dado por el método de Fourier. a) FG, b) Dioszegi y c) Degand.....- 168 -

Figura A8.8. Gráficos de resultados de la aplicación de los métodos de crecimiento equiaxial eutéctico de la aleación Al Cu 33 enfriado con 100 Litros por minuto de aire dado por los métodos de Fourier y Newton. a) FG, b) Dioszegi, y c) Degand.....- 168-

Figura A8.9. Gráficos de resultados de la aplicación de los métodos de crecimiento equiaxial eutéctico de la aleación Al Cu 33 enfriado con 150 Litros por minuto de aire dado por los métodos de Fourier y Newton. a) FG, b) Dioszegi, y c) Degand.....- 169 -

ÍNDICE DE TABLAS

Tabla 1.1 Ejemplos de aplicación de los modelos KGT y LGK	- 10 -
Tabla 1.3 Relación de métodos, materiales y variaciones de la ecuación 1.1, implementados recientemente con los métodos CA, CAFE y PFM.....	- 17 -
Tabla 1.4 Estado del arte de modelos y ecuaciones empleadas para determinar la rapidez de crecimiento dendrítico.....	- 23 -
Tabla 2.1 Métodos y características para determinar el punto de coherencia dendrítica- 35 -	-
Tabla 2.2 Valores de $k_{0,i}$ y m_i , empleados en el modelo.....	- 54 -
Tabla 2.3 Datos utilizados para el micro macro modelo que simula el enfriamiento y solidificación de las aleaciones eutécticas e hipoeutécticas Al-Cu [122], Al-Ni [123] y Al-Si. [124, 125].....	- 61 -
Tabla 2.4 Ejemplo de composición química de la aleación, base Al-Cu considerada para la obtención de los resultados mostrados en el a Figura 2.23.....	- 62 -
Tabla 3.1 Secuencias de ataque utilizados para revelar la macroestructura de las diversas aleaciones.	- 72 -
Tabla 3.2 Datos del proceso de cálculo para determinar la densidad de grano de la aleación Al-Cu de composición eutéctica, enfriada con diferente flujo de aire.....	- 74 -
Tabla 4.1 Densidad de granos de los tres sistemas a diferente velocidad.	- 85 -
Tabla 4.2 Parámetros cinéticos de solidificación de la aleación eutéctica Al-Cu diferentes flujos de aire de enfriamiento obtenidos con los métodos Fourier y Newton, así como los análisis FG y Dioszegi.	- 91 -
Tabla 4.3 Parámetros cinéticos de solidificación de la aleación eutéctica Al-Si a diferentes flujos de aire de enfriamiento obtenidos con los métodos Fourier y Newton, así como los análisis FG y Dioszegi.	- 91 -
Tabla 4.4 Parámetros cinéticos de solidificación de la aleación eutéctica Al-Ni diferentes flujos de aire de enfriamiento obtenidos con los métodos Fourier y Newton, así como los análisis FG y Dioszegi.	- 92 -
Tabla 4.5 Parámetros obtenidos de la regresión polinómica de los datos de la evolución del coeficiente combinado de transporte de calor en las diferentes aleaciones y flujos de aire. -	96 -
Tabla 4.6 Parámetros cinéticos obtenidos de la aplicación de la combinación de los métodos cinéticos FG y Dioszegi con los métodos de evolución de fracción sólida Newton y Fourier.	- 108 -
Tabla 4.7 Parámetros de la evolución del coeficiente combinado de transporte de calor, obtenidos de la regresión polinómica.....	- 113 -
Tabla A3.1. Diámetro y densidad de granos obtenidos en cada experimento.....	- 161 -
Tabla A5.1. Macroestructuras obtenidas de Aluminio-Silicio de composición eutéctica.-	163
Tabla A5.2. Macroestructuras obtenidas de Aluminio-Cobre de composición eutéctica.	164
Tabla A5.3. Macroestructuras obtenidas de Aluminio-Niquel de composición eutéctica.	165
Tabla A5.4. Macroestructuras obtenidas de aleación hipoeutécticas.....	- 166-

REFERENCIAS

- [1] D. M. Stefanescu, Science and engineering of casting solidification, New York, EUA: Springer, 2016.
- [2] M. Djurdjevic, G. Huber y Z. Odanovic, «Synergy between thermal analysis and simulation,» *Journal of thermal analysis and calorimetry*, vol. 111, nº 2, pp. 1365-1373, 2013.
- [3] J. Perepezko, «Recent advances in solidification microstructure—Experiments and computational analysis,» *Current Opinion in Solid State and Materials Science*, vol. 20, nº 1, pp. 1-2, 2016.
- [4] B. Cantor y K. O'Reilly, Solidification and casting, Oxford, UK: Institute of physical publishing bristol and philadelphia, 2003.
- [5] H. & C. A. Rafii-Tabar, «Multi-scale computational modelling of solidification phenomena,» *Physics Reports*, vol. 365, nº 3, pp. 145-249, 2002.
- [6] K. Nakajima, H. Zhang, K. Oikawa, M. Ohno y Jönsson P, «Methodological progress for computer simulation of solidification and casting,» *ISIJ international*, vol. 50, nº 12, pp. 1724-1734, 2010.
- [7] P. Thevoz, J. Desbiolles y M. Rappaz, «Modeling of equiaxed microstructure formation in casting,» *Metallurgical Transactions A*, vol. 20, nº 2, pp. 311-322, 1989.
- [8] S. Brown y J. Spittle, «Computer simulation of grain growth and macrostructure development during solidification,» *Materials science and technology*, vol. 5, nº 4, pp. 362-368, 1989.
- [9] M. Rappaz y C. Gandin, «Probabilistic modelling of microstructure formation in solidification processes,» *Acta metallurgica et materialia*, vol. 41, nº 2, pp. 345-360, 1993.
- [10] L. Beltran-Sanchez y D. Stefanescu, «A quantitative dendrite growth model and analysis of stability concepts,» *Metallurgical and Materials Transactions A*, vol. 35, nº 8, pp. 2471-2485, 2004.
- [11] A. Zyska, «CA Modeling of Microsegregation and Growth of Equiaxed Dendrites in the Binary Al-Mg Alloy,» *Materials*, vol. 14, nº 12, pp. 3393-3395, 2021.
- [12] X. Zhan, Y. Wei y Z. Dong, «Cellular automaton simulation of grain growth with different orientation angles during solidification process.,» *Journal of Materials Processing Technology*, vol. 208, nº 1, pp. 1-8, 2008.
- [13] H. L. Wei, J. W. Elmer y T. DebRoy, «Origin of grain orientation during solidification of an aluminum alloy,» *Acta Materialia*, vol. 115, nº 1, pp. 123-131, 2016.

- [14] C. A. Gandin, T. Jalanti y M. Rappaz, «Modeling of dendritic grain structures.,» *Modeling of Casting, Welding, and Advanced Solidification Processes*, vol. 1, n° 1, pp. 363-374, 1998.
- [15] W. J. Boettinger, J. A. Warren, C. Beckermann y A. Karma, «Phase-field simulation of solidification,» *Annual review of materials research*, vol. 32, n° 1, pp. 163-194, 2002.
- [16] I. Steinbach, «Phase-field models in materials science,» *Modelling and simulation in materials science and engineering*, vol. 17, n° 7, pp. 73-91, 2009.
- [17] P. P. Wu y B. R. Zing, «Phase Field Simulation on the Surface Morphology of Cu/Ti Nano Thin Film,» *In Materials Science Forum*, vol. 1035, n° 1, pp. 712-717, 2021.
- [18] R. Kobayashi, « Modeling and numerical simulations of dendritic crystal growth,» *Physica D: Nonlinear Phenomena*, vol. 63, n° 3, pp. 410-423, 1993.
- [19] A. A. Wheeler, W. J. Boettinger y G. B. McFadden, «Phase-field model for isothermal phase transitions in binary alloys.,» *Physical Review A*, vol. 45, n° 10, pp. 7424-7430, 1992.
- [20] J. A. Warren y W. J. Boettinger, «Prediction of dendritic growth and microsegregation patterns in a binary alloy using the phase-field method.,» *Acta Metallurgica et Materialia*, vol. 43, n° 2, pp. 689-703, 1995.
- [21] J. B. Allen, «Phase-field simulations of isomorphous binary alloys subject to isothermal and directional solidification,» *Multidiscipline Modeling in Materials and Structures*, vol. 17, n° 5, pp. 955-973, 2021.
- [22] Q. Chen, L. Zhang, S. Tang, C. Liang, C. Ma y W. Liu, «Examination of dendritic growth and microsegregation during solidification of Al–Li binary alloy using the phase-field simulation coupling CALPHAD data,» *Calphad*, vol. 74, pp. 102-121, 2021.
- [23] A. Mahata, M. A. Zaeem y M. I. Baskes, «Understanding homogeneous nucleation in solidification of aluminum by molecular dynamics simulations,» *Modelling and Simulation in Materials Science and Engineering*, vol. 26, n° 2, pp. 1-32, 2018.
- [24] N. Yamanaka, S. Sakane y T. Takaki, «multi-phase-field lattice Boltzmann model for polycrystalline equiaxed solidification with motion,» *Computational Materials Science*, vol. 197, pp. 124-131, 2021.
- [25] C. Yang, Q. Xu y B. Liu, «GPU-accelerated three-dimensional phase-field simulation of dendrite growth in a nickel-based superalloy,» *Computational Materials Science*, vol. 136, pp. 133-143, 2017.
- [26] C. Yang, H. Xia, Q. Xu y B. Liu, «Multiphase-field simulation of the solution heat treatment process in a Ni-based superalloy,» *Computational Materials Science*, vol. 196, p. 110550, 2021.

- [27] B. Bourdin, G. A. Francfort y J. J. Marigo, «Numerical experiments in revisited brittle fracture,» *Journal of the Mechanics and Physics of Solids*, vol. 48, nº 4, pp. 797-826, 2000.
- [28] B. Bourdin, «Numerical implementation of the variational formulation for quasi-static brittle fracture.,» *Interfaces and free boundaries*, vol. 9, nº 3, pp. 411-430, 2007.
- [29] J. S. Langer, «Instabilities and pattern formation in crystal growth,» *Reviews of modern physics*, vol. 52, nº 1, pp. 1-5, 1980.
- [30] M. Jolly y L. Katgerman, «Modelling of defects in aluminium cast products,» *Progress in Materials Science*, vol. 123, p. 100824, 2022.
- [31] D. Tournet, H. Liu y J. Llorca , «Phase-field modeling of microstructure evolution: Recent applications, perspectives and challenges.,» *Progress in Materials Science*, vol. 123, p. 100810, 2022.
- [32] N. Moelans, B. Blanpain y P. Wollants, «An introduction to phase-field modeling of microstructure evolution,» *Calphad*, vol. 32, nº 2, pp. 268-294, 2008.
- [33] W. Kurz, M. Rappaz y R. Trivedi, «Progress in modelling solidification microstructures in metals and alloys. Part II: dendrites from 2001 to 2018,» *International Materials Reviews*, vol. 66, nº 1, pp. 30-76, 2021.
- [34] T. Carozzani, H. Dignonnet y C. A. Gandin, «3D CAFE modeling of grain structures: application to primary dendritic and secondary eutectic solidification,» *Modelling and Simulation in Materials Science and Engineering*, vol. 20, nº 1, p. 015010, 2011.
- [35] F. Gonzales y M. Rappaz, «Dendrite growth directions in aluminum-zinc alloys,» *Metallurgical and Materials Transactions A*, vol. 37, nº 9, pp. 2797-2806, 2006.
- [36] A. Pineau, G. Guillemot, D. Tournet, A. Karma y C. A. Gandin, «Growth competition between columnar dendritic grains—Cellular automaton versus phase field modeling,» *Acta Materialia*, vol. 155, pp. 286-301, 2018.
- [37] T. Carozzani, C. A. Gandin, H. Dignonnet, M. Bellet, K. Zaidat y Y. Fautrelle, «Direct simulation of a solidification benchmark experiment.,» *Metallurgical and Materials Transactions A*, vol. 44, nº 2, pp. 873-887, 2013.
- [38] G. Guillemot, C. A. Gandin, H. Conbeau y R. Heringer, «A new cellular automaton—finite element coupling scheme for alloy solidification.,» *Modelling and Simulation in Materials Science and Engineering*, vol. 12, nº 3, pp. 545-560, 2004.
- [39] J. Lipton, M. E. Glicksman y W. Kurz, «Dendritic growth into undercooled alloy metals,» *Materials Science and Engineering*, vol. 65, nº 1, pp. 57-63, 1984.
- [40] W. Kurz, B. Giovanola y R. Trivedi, «Theory of microstructural development during rapid solidification,» *Acta metallurgica*, vol. 34, nº 5, pp. 823-830, 1986.
- [41] Y. Zhai, K. Pan y D. Wu, «Acquiring High-Quality Oil Casing Steel 26CrMoVTiB under Optimal Continuous Casting Process Conditions,» *Metals*, vol. 9, nº 9, pp. 993-1015, 2019.

- [42] H. An, Y. Bao, M. Wang, O. Yang y Y. Dang, «Numerical and experimental investigation of solidification structure evolution and reduction of centre segregation in continuously cast GCr15 bloom,» *Ironmaking & Steelmaking*, vol. 47, nº 9, pp. 1063-1077, 2020.
- [43] J. Fang, X. Liu, Y. Fan, M. Xie, Y. Chen y Y. Yasng, «Numerical Simulation of Solidification Structures of Ag–28Cu–1Ni Alloy through Continuous Casting Based on Three-Dimensional CAFE Method,» *Materials Transactions*, vol. 61, nº 7, pp. 1230-1238, 2020.
- [44] Y. Jia, D. Zhao, C. Li, L. Bao, Q. Le, H. Wang y K. Wang, «Study on solidification structure evolution of direct-chill casting high purity copper billet using cellular automaton-finite element method,» *Metals*, vol. 10, nº 8, pp. 1052-1061, 2020.
- [45] Q. Chen, H. Li y H. Shen, «Transient modeling of grain structure and macrosegregation during direct chill casting of Al-Cu alloy,» *Processes*, vol. 7, nº 6, pp. 333-341, 2019.
- [46] H. Shi, Q. Chen, K. Li y H. Shen, «Numerical Simulation of Grain Structure and Macrosegregation of Electroslog Remelting Process Based on Cellular Automaton-Finite Element Method,» *Metallurgical and Materials Transactions B*, vol. 53, nº 1, pp. 107-120, 2022.
- [47] S. Chen, G. Guillemot y C. A. Gandin, «Three-dimensional cellular automaton-finite element modeling of solidification grain structures for arc-welding processes,» *Acta materialia*, vol. 115, pp. 448-467, 2016.
- [48] J. Hajkowski, P. Popielarski y Z. Ignaszak, «Cellular automaton finite element method applied for microstructure prediction of aluminium casting treated by laser beam.,» *Archives of Foundry Engineering.*, vol. 19, pp. 111-118, 2019.
- [49] K. Teferra y D. J. Rowenhorst, «Optimizing the cellular automata finite element model for additive manufacturing to simulate large microstructures,» *Acta Materialia*, vol. 213, pp. 1-35, 2021.
- [50] Q. Chen y H. Shen, «Direct macroscopic modeling of grain structure and macrosegregation with a cellular automaton–finite element model,» *Metals*, vol. 9, nº 2, pp. 177-189, 2019.
- [51] C. Xue, N. Blanc, F. Soulié, C. Bordreuil, F. Deschaux-Beaume, G. Guillemot y C. A. Gandin, «Structure and texture simulations in fusion welding processes–comparison with experimental data,» *Materialia*, vol. 21, pp. 1-18, 2022.
- [52] J. Hajkowski, R. Sika, M. Rogalewicz, P. Popielarski, W. Matysiak y S. Legutko, «Material Databases and Validation in Modelling the Structure of Castings Using the Cellular Automaton Method,» *Materials*, vol. 14, nº 11, pp. 3055-3070, 2021.
- [53] Y. Zhang, J. Zhou, Y. Yin, X. Shen, T. A. Shehabeldeen y X. Ji, «GPU-Accelerated cellular automaton model for grain growth during directional solidification of nickel-based superalloy,» *Metals*, vol. 11, nº 2, pp. 298-310, 2021.

- [54] S. Hu, L. Liu, W. Yang, J. Zhang, T. Huang, Y. Wang y X. Zhou, «Competitive converging dendrites growth depended on dendrite spacing distribution of Ni-based bi-crystal superalloys,» *Journal of Alloys and Compounds*, vol. 735, pp. 1878-1884, 2018.
- [55] A. F. Ferreira, K. G. Paradela, P. Felipe, Z. Alcântara y A. Garcia, «Phase-field simulation of microsegregation and dendritic growth during solidification of hypoeutectic Al-Cu alloys,» *Materials Research*, vol. 20, pp. 423-429, 2017.
- [56] W. Kurz, D. J. Fisher y R. Trivedi, «Progress in modelling solidification microstructures in metals and alloys: dendrites and cells from 1700 to 2000,» *International Materials Reviews*, vol. 64, nº 6, pp. 311-354, 2019.
- [57] W. A. West, «PHASE BOUNDARIES IN MEDIUM-ALLOY STEELS,» *TRANSACTIONS OF THE AMERICAN INSTITUTE OF MINING AND METALLURGICAL ENGINEERS*, vol. 167, pp. 535-549, 1946.
- [58] M. D. A. Martorano y V. B. Biscuola, «Predicting the columnar-to-equiaxed transition for a distribution of nucleation undercoolings,» *Acta Materialia*, vol. 57, nº 2, pp. 607-615, 2009.
- [59] S. Kou, «Welding metallurgy,» *MRS Bulletin*, vol. 28, nº 9, pp. 674-675, 2003.
- [60] C. Hagenlocher, F. Fetzner, D. Weller, R. Weber y T. Graf, «Explicit analytical expressions for the influence of welding parameters on the grain structure of laser beam welds in aluminium alloys,» *Materials & Design*, vol. 174, pp. 107-109, 2019.
- [61] P. Stritt, C. Hagenlocher, R. Weber y T. Graf, «The effect of laser welding parameters on the grain structure distribution in the resultant weld,» *International Congress on Applications of Lasers & Electro-Optics*, vol. 10, pp. 1201-1203, 2016.
- [62] P. Schempp y M. Rethmeier, «Understanding grain refinement in aluminium welding,» *Welding in the World*, vol. 59, nº 6, pp. 767-784, 2015.
- [63] I. V. Gómez, E. V. Viteri, J. Montero, M. Djurdjevic y G. Huber, «The determination of dendrite coherency point characteristics using three new methods for aluminum alloys,» *Applied Sciences*, vol. 8, nº 8, pp. 1236-1241, 2018.
- [64] E. Khajeh y D. M. Maijer, «Inverse analysis of eutectic nucleation and growth kinetics in hypoeutectic Al-Cu alloys,» *Metallurgical and Materials Transactions A*, vol. 42, nº 1, pp. 158-169, 2011.
- [65] J. D. Verhoeven y O. S. Luna, *Fundamentos de metalurgia física*, CDMX: Limusa, 1987.
- [66] C. S. Tiwary, P. Pandey, S. Sarkar, R. Das, S. Samal, K. Biswas y K. Chattopadhyay, «Five decades of research on the development of eutectic as engineering materials,» *Progress in Materials Science*, vol. 123, pp. 1-33, 2022.
- [67] J. D. Hunt y K. A. Jackson, «Lamellar and rod eutectic growth,» *Transactions Metallurgical Society AIME*, vol. 236, pp. 1129-1142, 1966.

- [68] L. Luo, C. Wei, X. M. Liu y X. Wang, «Research on Microstructure Evolution of Al–Al₂Cu Eutectic by Regional Melting under Directional Solidification,» *Crystal Research and Technology*, vol. 54, nº 10, pp. 109-118, 2019.
- [69] Q. Tan, C. Deng, Y. Mao y G. He, «Evolution of primary phases and high-temperature compressive behaviors of as-cast AuSn₂₀ alloys prepared by different solidification pathways,» *Gold Bulletin*, vol. 44, nº 1, pp. 27-35, 2011.
- [70] W. Kurz y D. Fisher, *Fundamentals of Solidification*, Zurich: Trans Tech Pubn, 2017.
- [71] A. V. Catalina, S. Sen y D. M. Stefanescu, «A new analytical approach to predict spacing selection in lamellar and rod eutectic systems,» *Metallurgical and Materials Transactions A*, vol. 34, nº 2, pp. 383-394, 2003.
- [72] R. Trivedi, P. Magnin y W. Kurz, «Theory of eutectic growth under rapid solidification conditions.,» *Acta Metallurgica*, vol. 35, nº 4, pp. 971-980., 1987.
- [73] C. Degand, D. M. Stefanescu y G. Laslaz, «An experimental, and analytical study of equiaxed eutectic,» *Solidification Science and Processing*, pp. 55-63, 1996.
- [74] A. Diószegi y I. L. Svensson, «Inverse kinetic analysis method to study eutectic growth,» *International Journal of Cast Metals Research*, vol. 18, nº 1, pp. 41-46, 2005.
- [75] M. Avrami, «Granulation, phase change, and microstructure kinetics of phase change. III,» *The Journal of chemical physics*, vol. 9, nº 2, pp. 177-184, 1941.
- [76] A. Papapetrou, «Untersuchungen über dendritisches Wachstum von Kristallen,» *Zeitschrift für Kristallographie-Crystalline Materials*, vol. 92, nº 1, pp. 89-130, 1935.
- [77] D. E. Temkin, «Growth rate of the needle-crystal formed in a supercooled melt,» *In Soviet Physics Doklady*, vol. 5, pp. 609-619, 1960.
- [78] G. F. Bolling y W. A. Tiller, «Growth from the melt. I. Influence of surface intersections in pure metals,» *Journal of Applied Physics*, vol. 31, nº 8, pp. 1345-1350, 1960.
- [79] B. Caroli y H. Müller-Krumbhaar, «Recent advances in the theory of free dendritic growth,» *ISIJ international*, vol. 32, nº 12, pp. 1541-1550, 1995.
- [80] A. Karma y B. G. Kotliar, «Pattern selection in a boundary-layer model of dendritic growth in the presence of impurities,» *Physical Review A*, vol. 31, nº 5, pp. 3266-3271, 1985.
- [81] D. A. Kessler, J. Koplik y H. Levine, «Kessler, D. A., Koplik, J., & Levine, H.,» *Physical Review A*, vol. 34, nº 6, pp. 4980-4992, 1986.
- [82] B. Liu, Q. Xu, T. Jing, H. Shen y Z. Han, «Advances in multi-scale modeling of solidification and casting processes,» *Journal of Materials*, vol. 63, nº 4, pp. 19-25, 2011.
- [83] X. B. Qi, Y. Chen, X. H. Kang, D. Z. Li y T. Z. Gong, «Modeling of coupled motion and growth interaction of equiaxed dendritic crystals in a binary alloy during solidification,» *Scientific reports*, vol. 7, nº 1, pp. 1-16, 2017.

- [84] C. Yang, Q. Xu y B. Liu, «A high precision extrapolation method in multiphase-field model for simulating dendrite growth,» *Journal of Crystal Growth*, vol. 490, nº 1, pp. 25-34, 2018.
- [85] G. E. Nash, «Capillarity-Limited Steady-State Dendritic Growth. Part 1. Theoretical Development,» NAVAL RESEARCH LAB WASHINGTON D C, WASHINGTON D C, 1974.
- [86] L. Nastac y D. M. Stefanescu, «An analytical model for solute redistribution during solidification of planar, columnar, or equiaxed morphology,» *Metallurgical Transactions A*, vol. 24, nº 9, pp. 2107-2118, 1993.
- [87] M. A. Jaafar, D. R. Rousse, S. Gibout y J. P. Bédécarrats, «A review of dendritic growth during solidification: Mathematical modeling and numerical simulations,» *Renewable and Sustainable Energy Reviews*, vol. 74, nº 1, pp. 1064-1079, 2017.
- [88] Y. Xu, D. Casari, R. H. Mathiesen y Y. Li, «Revealing the heterogeneous nucleation behavior of equiaxed grains of inoculated Al alloys during directional solidification,» *Acta Materialia*, vol. 149, nº 1, pp. 312-325, 2018.
- [89] A. Bogno, H. Nguyen-Thi, G. Reinhart, B. Billia y J. Baruchel, «Growth and interaction of dendritic equiaxed grains: In situ characterization by synchrotron X-ray radiography,» *Acta Materialia*, vol. 61, nº 4, pp. 1303-1315, 2013.
- [90] D. C. Tsai y W. S. Hwang, «Numerical simulation of the solidification processes of copper during vacuum continuous casting,» *Journal of crystal growth*, vol. 343, nº 1, pp. 45-54, 2012.
- [91] G. J. Wang, Z. H. Chen, G. X. Zhang y H. Chen, «Model predictive inverse method for recovering boundary conditions of two-dimensional ablation,» *Chinese Physics B*, vol. 30, nº 3, pp. 302-310, 2021.
- [92] A. G. Murphy, G. Reinhart, H. Nguyen-Thi, G. S. Abou Jaoude y D. J. Browne, «Meso-scale modelling of directional solidification and comparison with in situ X-ray radiographic observations made during the MASER-12 XRMON microgravity experiment,» *Journal of alloys and compounds*, vol. 573, pp. 170-176, 2013.
- [93] H. Soltani, F. Ngomesse, G. Reinhart, M. C. Benoudia, M. Zahzouh y H. Nguyen-Thi, «Impact of gravity on directional solidification of refined Al-20wt.% Cu alloy investigated by in situ X-radiography,» *Journal of Alloys and Compounds*, vol. 862, pp. 185-192, 2021.
- [94] L. M. Martyushev y A. S. Soboleva, «Phenomenological model of nonequilibrium solidification,» *Physica A: Statistical Mechanics and its Applications*, vol. 392, nº 22, pp. 5757-5763, 2013.
- [95] M. Li, T. Tamura y K. Miwa, «Controlling microstructures of AZ31 magnesium alloys by an electromagnetic vibration technique during solidification: From experimental observation to theoretical understanding.,» *Acta Materialia*, vol. 55, nº 14, pp. 4635-4643, 2007.

- [96] M. Ahmadein, M. Wu y A. Ludwing, «Analysis of macrosegregation formation and columnar-to-equiaxed transition during solidification of Al-4 wt.% Cu ingot using a 5-phase model,» *Journal of crystal growth*, vol. 417, pp. 65-74, 2015.
- [97] G. P. Ivantsov, «Temperatuore Pole Vokrug Sharoobraznogo Tsilindricheskogo I igloobraznog o Kristalla rastushego v pereokhlazhdennom Rasplave,» *Dokladi Akademii Nauk SSSR*, vol. 58, pp. 857-869, 1947.
- [98] J. S. Langer y H. Müller-Krumbhaar, «Theory of dendritic growth—I. Elements of a stability analysis,» *Acta Metallurgica*, vol. 26, nº 11, pp. 1681-1687, 1978.
- [99] A. Löffler, K. Hack y M. Rettenmayr, «Predicting microsegregation in multicomponent aluminum alloys—progress in thermodynamic consistency,» *International journal of materials research*, vol. 101, nº 11, pp. 1398-1404, 2010.
- [100] T. Koseki, T. Matsumiya, W. Yamada y T. Ogawa, «Numerical modeling of solidification and subsequent transformation of Fe-Cr-Ni alloys,» *Metallurgical and Materials Transactions A*, vol. 25, nº 6, pp. 1309-1321, 1994.
- [101] S. L. Chen, W. Oldfield, Y. A. Chang y M. K. Thomas, «Modeling solidification of turbine blades using theoretical phase relationships,» *Metallurgical and Materials Transactions A*, vol. 25, nº 7, pp. 1525-1533, 1994.
- [102] T. Matsumiya, «Applications of phase diagrams to steel processing,» *Tecnologia em Metalurgia, Materiais e Mineração*, vol. 13, nº 1, pp. 25-36, 2016.
- [103] J. Zou, R. Doherty, H. P. Wang, E. M. Perry y L. R. Kaisand, «Micro-Macro Modeling of the Investment Casting of Multi-Component Superalloys,» *Modeling of Casting, Welding and Advanced Solidification Processes*, vol. 6, pp. 45-53, 1993.
- [104] M. Morua, M. Ramirez-Argaez y C. Gonzalez-Rivera, «Experimental determination of grain growth kinetics during eutectic solidification,» *Mater. Science: An Indian Journal*, vol. 9, pp. 31-39, 2013.
- [105] M. Morua, E. Peña, R. Aparicio, M. Ramirez-Argaez y C. Gonzalez-Rivera, «Numerical processing of cooling curves to obtain growth parameters during eutectic solidification,» *MRS Online Proceedings Library (OPL)*, vol. 1373, pp. 303-318, 2012.
- [106] M. Morua-Ramírez, M. Ramírez-Argaez, C. González-Rivera, A. Juárez-Hernández y M. Herrera-Trejo, «Determinación de la cinética de crecimiento de grano durante la solidificación de una aleación eutéctica Al-Cu,» *Revista mexicana de física*, vol. 60, nº 3, pp. 176-183, 2014.
- [107] M. B. Djurdjevic, J. H. Sokolowski y Z. Odanovic, «Determination of dendrite coherency point characteristics using first derivative curve versus temperature,» *Journal of thermal analysis and calorimetry*, vol. 109, nº 2, pp. 857-882, 2012.
- [108] G. Huber, M. B. Djurdjevic y S. Manasijević, «Quantification of feeding regions of hypoeutectic Al-(5, 7, 9) Si-(0-4) Cu (wt.%) alloys using cooling curve analysis,» de *In Mass Production Processes*, London, UK, IntechOpen, 2019, pp. 21-36.

- [109] C. Peeratatsuwan, P. Pandee, U. Patakham y C. Limmaneevichitr, «Effect of erbium on the rheocast quality index of A356 semisolid feedstock,» *Materials Science and Technology*, vol. 37, nº 4, pp. 424-438, 2021.
- [110] I. V. Gómez, E. V. Viteri, J. Montero, M. Djurdjevic y G. Huber, «The determination of dendrite coherency point characteristics using three new methods for aluminum alloys,» *Applied Sciences*, vol. 8, nº 8, pp. 1236-1244, 2018.
- [111] M. Malekan, S. Naghdali, S. Abrishami y S. H. Mirghaderi, «Effect of cooling rate on the solidification characteristics and dendrite coherency point of ADC12 aluminum die casting alloy using thermal analysis.,» *Journal of Thermal Analysis and Calorimetry*, vol. 124, nº 2, pp. 601-609, 2016.
- [112] M. Johnsson y L. Bäckerud, «The influence of composition on equiaxed crystal growth mechanisms and grain size in Al alloys,» *International Journal of Materials Research*, vol. 87, nº 3, pp. 216-220, 1996.
- [113] W. T. Kierkus y J. H. Sokolowski, «Recent Advances in CCA: A New Method of Determining Baseline Equations,» *Transactions of the American Foundrymen's Society*, vol. 107, pp. 161-168, 1999.
- [114] G. Eisaabadi y A. Nouri, «Effect of Sr on the microstructure of electromagnetically stirred semi-solid hypoeutectic Al–Si alloys,» *International Journal of Metalcasting*, vol. 12, nº 2, pp. 292-297, 2018.
- [115] P. Snopiński, M. Krol, T. Tański y B. Krupińska, «Effect of cooling rate on microstructural development in alloy ALMG9.,» *Journal of Thermal Analysis and Calorimetry*, vol. 133, nº 1, pp. 378-390, 2018.
- [116] F. P. Incropera, D. P. DeWitt, T. L. Bergman y A. S. Lavine, *Fundamentals of heat and mass transfer*, New York: Wiley, 1996.
- [117] J. T. Berry y R. D. Pehlke, «Modeling of solidification heat transfer,» de *ASM Handbook Volume 15 Casting*, Ohio, ASM International, 1988, pp. 858-866.
- [118] H. P. Wang, J. Zou, E. M. Perry y R. Doherty, «Investment Casting Solidification Simulation of Nickel-Based Superalloys: Micro Modeling Aspects,» *Transactions of the American Foundrymen's Society*, vol. 101, pp. 771-779, 1993.
- [119] M. Rappaz y P. Thevoz, «Solute diffusion model for equiaxed dendritic growth,» *Acta Metallurgica*, vol. 35, nº 7, pp. 1487-1497, 1987.
- [120] C. S. Kanetkar y D. M. Stefanescu, «Macro-micro modeling of solidification of hypoeutectic and eutectic Al-Si alloys,» *AFS Transactions*, vol. 60, pp. 591-598, 1988.
- [121] ASM international, *Handbook*, A. S. M. "Alloy phase diagrams.", Ohio: ASM international, 1992.
- [122] A. E. Ares, S. F. Gueijman y C. E. Schvezov, «An experimental investigation of the columnar-to-equiaxed grain transition in aluminum–copper hypoeutectic and eutectic alloys.,» *Journal of crystal Growth*, vol. 312, nº 14, pp. 2154-2170, 2010.

- [123] H. A. Kaya, U. Büyük, E. Çadırlı y N. Maraşlı, «Measurements of the microhardness, electrical and thermal properties of the Al–Ni eutectic alloy.,» *Materials & Design*, vol. 34, pp. 707-712, 2012.
- [124] C. Gonzalez-Rivera, B. Campillo, M. Castro, M. Herrera y J. Juarez-Islas, «On the local microstructural characteristics observed in sand cast Al–Si alloys,» *Materials Science and Engineering: A*, vol. 279, nº 1, pp. 149-159, 2000.
- [125] Y. T. Chen, Chemical effect on diffusion in intermetallic compounds., Los Angeles: University of California, 2016.
- [126] R. Aparicio, C. Gonzalez-Rivera, M. Ramirez-Argaez, G. Barrera y G. Trapaga, «Newton thermal analysis of unmodified and strontium modified Al-Si alloys,» *Kovove Materialy-Metallic Materials*, vol. 51, nº 4, pp. 211-220, 2013.
- [127] L. Backerud, G. Chai y J. Tamminen, «Solidification characteristics of aluminum alloys,» *Foundry alloys. American Foundrymen's Society*, vol. 2, pp. 266-280, 1990.
- [128] P. Walker y W. H. Tarn, CRC handbook of metal etchants, Boca Raton, Florida: CRC press, 1990.
- [129] ASTM international, «Standard test methods for determining average grain size ASTM E112-13,» ASTM international, Conshohocken, PA, 2021.
- [130] W. Oldfield, «A quantitative approach to casting solidification: freezing of cast iron,» *American Society for Metals Transactions*, vol. 59, pp. 945-955, 1966.
- [131] E. Fraś, K. Wiencek, A. A. Burbelko y M. Górny, «The application of some probability density functions on heterogeneous nucleation.,» *Materials Science Forum. Trans Tech Publications*, vol. 508, pp. 425-430, 2006.
- [132] D. D. Goettsch y J. A. Dantzig, «Modeling microstructure development in gray cast irons,» *Metallurgical and Materials Transactions A*, vol. 25, nº 5, pp. 1063-1079, 1994.
- [133] I. Maxwell y A. Hellawell, «A simple model for grain refinement during solidification.,» *Acta Metallurgica*, vol. 23, nº 2, pp. 229-237, 1975.
- [134] D. M. Stefanescu, G. Upadhyay y D. Bandyopadhyay, «Heat transfer-solidification kinetics modeling of solidification of castings,» *Metallurgical Transactions A*, vol. 21, nº 3, pp. 997-1005, 1990.
- [135] P. Thevoz, J. L. Desbiolles y M. Rappaz, «Modeling of equiaxed microstructure formation in casting,» *Metallurgical Transactions A*, vol. 20, nº 2, pp. 311-322, 1989.

ANEXO I. FUNDAMENTOS TERMODINÁMICOS DE LA SOLIDIFICACIÓN.

Con el fin de buscar una metodología que complemente las teorías de crecimiento equiaxial de aleaciones de composición eutéctica e hipoeutéctica, a continuación, se visualiza el estado del arte de los métodos de análisis de crecimiento dendrítico equiaxial y eutéctico equiaxial.

La fuerza que dirige cualquier transformación de fase es el cambio en la energía libre. Esto ocurre cuando la energía de la fase líquida se iguala a la fase sólida, conduciendo a que la energía libre es cero.

$$\Delta G_v = G_L - G_S = (H_L - H_S) - T_e(S_L - S_S) = 0 \quad (\text{A1})$$

Donde ΔG_v es el cambio de energía libre de Gibbs con el volumen constantes, G_L es la energía libre Gibbs en estado líquido y G_S en estado sólido, H_L la entalpia en estado líquido y H_S en estado sólido, T_e es la temperatura de transformación de fase, S_L entropía en estado líquido y S_S en sólido.

Se puede reescribir como:

$$\Delta H_f = T_e \Delta S_f \quad (\text{A2})$$

Donde $\Delta H_f = H_L - H_S$ que es el cambio de entalpia durante la solidificación y ΔS_f es el cambio de entropía de fusión a la temperatura T_e .

Sustituyendo **Ecuación A1** con A2, se obtiene que:

$$\Delta G_v = \Delta H_f - T \frac{\Delta H_f}{T_e} = \Delta H_f \frac{T_e - T}{T_e} = \Delta S_f \Delta T \quad (\text{A3})$$

Donde ΔT es el subenfriamiento que ocurre en la transformación sólido/líquido. De la **Ecuación A4** el subenfriamiento se define como:

$$\Delta T = \frac{\Delta G_v}{\Delta S_f} \quad (\text{A4})$$

Que al analizarlo se obtiene que al equilibrio la energía libre de Gibbs volumétrica siendo cero, el subenfriamiento será cero.

Sin embargo, el estado de equilibrio determinaría un enfriamiento muy lento, algo que no es viable para la mayoría de las piezas industrializadas. A lo que se debe considerar la energía liberada por la curvatura de las microestructuras, por la transferencia de calor en la pieza, el cambio de composición y la variación de la presión.

Subenfriamiento por curvatura o capilar: Se hace presente cuando la interfaz sólido-líquido no es plana. La curvatura es determinada por la variación del área interfacial dividida por el cambio de volumen, y dependiendo de la geometría formada afectara en mayor medida el subenfriamiento total.

La **Figura A1.1** muestra un esquema explicativo del origen de la curvatura, asumiendo una partícula esférica de radio r , al equilibrio el radio sería infinito, formando un monocristal

perfecto mientras que al ir disminuyendo el radio la curva de la energía libre respecto a la temperatura se ve abatida.

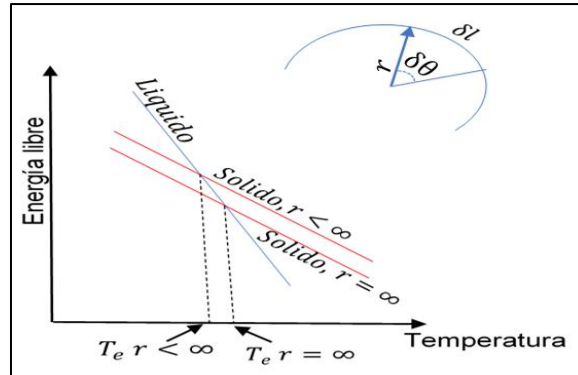


Figura A1.34 Esquema de cambio de energía libre respecto a la temperatura al estimar una partícula esférica.

La razón de cambio del volumen respecto al radio de la esfera con la energía libre es $\frac{d}{dr}(V \Delta G_v) = \frac{d}{dr}\left(\frac{4}{3}\pi r^3 \Delta G_v\right)$ mientras que la energía dada por la formación superficial es: $\frac{d}{dr}(4\pi r^2 \gamma)$, donde γ es la energía superficial. Considerando que solo se presenta el cambio energético derivado de la superficie y el volumen: $4\pi r^2 \Delta G_v = 8\pi r \gamma$, obteniendo que: $\Delta G_v = \frac{2\gamma}{r}$, al despejar respecto a la **Ecuación A2**, se obtiene que: $\Delta T_r = T_e - T_e^r = \frac{2\gamma}{\Delta S_f r}$, es conocido el coeficiente de Gibbs-Thomson como: $\Gamma = \frac{\gamma}{\Delta S_f}$; por lo que el subenfriamiento por curvatura es definido por la ecuación:

$$\Delta T_r = \frac{2\Gamma}{r} \tag{A5}$$

Subenfriamiento por efecto térmico: Cuando la nucleación se ve afectada por un alto valor de entalpia de transformación, provoca que en regiones de inicio de solidificación no transfiera energía al seno de la materia que se encuentra solidificando. En la **Figura A1.2** se encuentra un esquema que representa el enfriamiento de una pieza, la dimensión “x” parte de la frontera de la pieza y el aumento corresponde a adentrarse, cuando la frontera de la pieza alcanza la temperatura de transformación T_e , la frontera sigue enfriando, formando una capa (δ_T) que va disipando la energía de transformación de fase como relación de la capacidad calorífica ($\frac{\Delta H_f}{c}$), donde

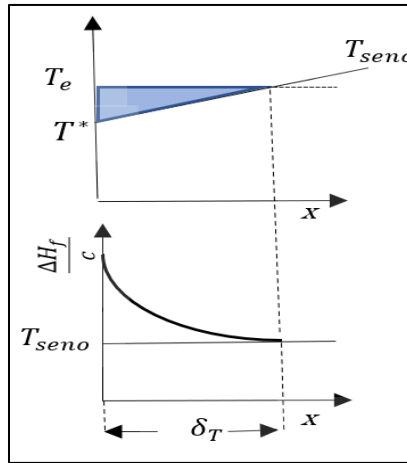


Figura A1.35 Esquema de la distribución térmica respecto a la posición, correlacionada con la entalpia y capacidad calorífica del sistema.

El subenfriamiento térmico corresponde a la diferencia de la temperatura en el seno del material y la temperatura reportada de transformación, como se puede ver en la **Figura 1.10** es la misma diferencia entre el seno y en la frontera del material (T^*),

$$\Delta T_T = T_e - T_{seno} \quad (A6)$$

Subenfriamiento por efecto constitucional o solutal: En aleaciones con perfil de concentración se introduce un cambio en la energía libre, que en consecuencia trae a este subenfriamiento. La **Figura A1.3** muestra un ejemplo del grafico temperatura-composición de una aleación eutéctica, al analizar el enfriamiento de la aleación con concentración C_o , al tocar la línea de transformación liquidus la composición que comienza a solidificar contiene la concentración C_s^* que al inicio ocurre a la temperatura T_L , al continuar enfriando la composición que va solidificando cambia a razón de la pendiente liquidus m_L que corresponde a la razón de cambio de la modificación de temperatura (ΔT_L) respecto a la composición (ΔC), mostrando la ecuación que define al sub enfriamiento constitucional como:

$$\Delta T_c = T_L - T^* = -m_L \Delta C = -m_L(C_L^* - C_o) \quad (A7)$$

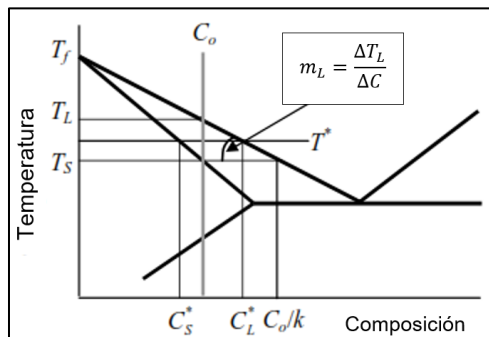


Figura A1.36 Esquema de la distribución la temperatura respecto a la composición, mostrándolos cambios de fase.

Subenfriamiento por efecto de la presión: Es aplicable cuando el material está sometido a presión, esto ocurre en diversos procesos como el colado a presión. Partiendo de la

definición de la energía libre de Helmholtz por unidad molar, la que se expresa como: $\Delta F = E + \Delta P V_L - \Delta T_p S_f$, donde ΔF es la energía libre de Helmholtz, E la energía interna, ΔP es el cambio de presión, V_L es el volumen del material, ΔT_p es el subenfriamiento por presión; al despejar esta expresión se obtiene que la ecuación:

$$\Delta T_p = \frac{\Delta P \Delta V}{\Delta S_f} \quad (A8)$$

Sub enfriamiento por efecto cinético: Corresponde al movimiento atómico que se da en la interfaz sólido-líquido, la razón de cambio de la concentración respecto al tiempo en la transformación de solidificación $\left(\frac{dn}{dt}\right)_f$ y de fusión $\left(\frac{dn}{dt}\right)_s$, si están al equilibrio deberían ser iguales, en ambos casos son dependientes de la temperatura dados por: $\left(\frac{dn}{dt}\right)_f = p_s n_s v_s \exp\left(-\frac{\Delta G_f}{k_B T}\right)$ y $\left(\frac{dn}{dt}\right)_s = p_L n_L v_L \exp\left(-\frac{\Delta G_s}{k_B T}\right)$, siendo la densidad del sólido y líquido, cantidades de moles en sólido y líquido, volumen en sólido y líquido, de fusión y solidificación, así como la constante de Boltzman. En la **Figura A1.4** se muestra la rapidez de cambio de concentración respecto a la temperatura para el proceso de fusión y solidificación.

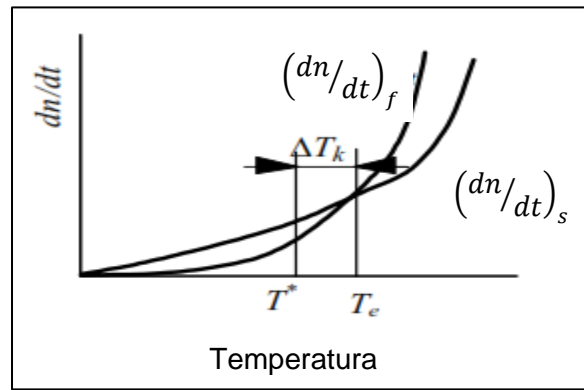


Figura A1.37 Esquema del cambio de concentración respecto al tiempo en función de la temperatura, en el caso de no encontrar el equilibrio entre el cambio de solidificación y fusión.

Identificando la diferencia del cambio concentración respecto al tiempo y considerando que el volumen ocupado por las diferentes fases es distinto: $\left(\frac{dn}{dt}\right)_f - \left(\frac{dn}{dt}\right)_s = v = v_m - v_m \exp\left(\frac{-\Delta G}{RT_e}\right)$ (aquí v es la rapidez de cambio de concentración fuera de equilibrio y v_m es la estimación de rapidez máxima), usando la serie de expansión para exponenciales de tipo $f(x) = 1 - e^{-x} \approx x$, usando hasta el segundo termino de mayor orden, entonces: $v = v_m \left(\frac{\Delta G}{RT_e}\right)$; sustituyendo con la ecuación 1.2 y 1.4:

$$\Delta T_k = \frac{RT_e^2 v}{\Delta H_f v_s} \quad (A9)$$

El subenfriamiento total corresponde a la suma de las Ecuaciones A 6,7,8 Y 9 como se muestra a continuación:

$$\Delta T = \Delta T_r + \Delta T_T + \Delta T_c + \Delta T_p + \Delta T_k = \frac{2\Gamma}{r} + (T_e - T_{seno}) - m_L(C_L^* - C_o) + \frac{\Delta P \Delta V}{\Delta S_f} + \frac{RT_e^2 v}{\Delta H_f v_s} \quad (A10)$$

Al considerar el origen del subenfriamiento, partiendo de fenómenos presentes durante la solidificación, se identifica que afecta directamente en la predicción de la cinética de crecimiento de grano, este último es esencial para conocer las propiedades mecánicas de los materiales. Sin embargo, la complejidad de los sistemas sigue siendo alta, con múltiples fenómenos físicos, la **Ecuación A1.4** exponen cada fenómeno por medir en cada sistema bajo estudio, existen modelos que simplifican esto y que obtienen sus datos partiendo de entender el crecimiento.

ANEXO II. DEDUCCIÓN DETALLADA DE ECUACIONES DEL MICROMACROMODELO.

La Figura A2.1 Es la representación tridimensional de la distribución de los nodos.

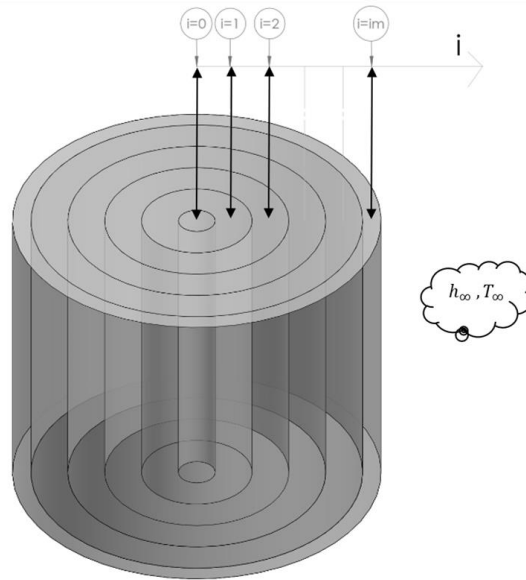


Figura A2.1 Representación isométrica de la distribución de nodos.

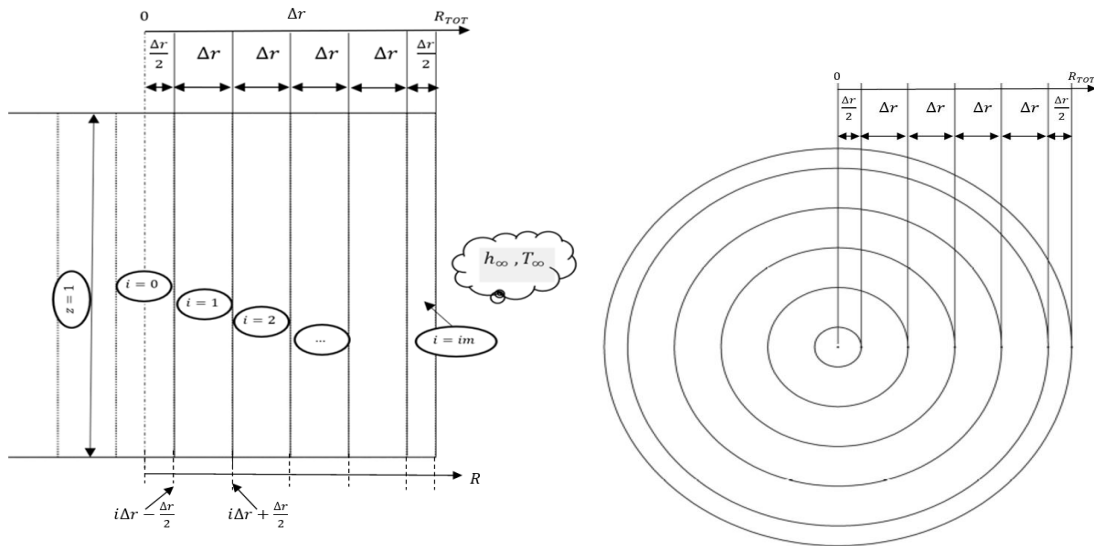


Figura A2.2 Representaciones bidimensionales de la distribución de nodos.

Tipificación de tres tipos de nodos:

Coordenada real	Coordenada adimensional	Tipo
$r = 0$	$i = 0$	Adiabático
$0 < r < R_{TOT}$	$0 < i < im$	Seno del metal
$r = R_{TOT}$	$i = im$	convectivo

$$\frac{4\Delta tk}{\Delta r \rho C_p} \frac{\{T_i^{t+\Delta t} - T_{i+1}^{t+\Delta t}\}}{(\Delta r)} = \{T_i^t - T_i^{t+\Delta t}\} + \frac{\Delta H_s \Delta f_s}{C_p}$$

$$4Fo\{T_i^{t+\Delta t} - T_{i+1}^{t+\Delta t}\} = \{T_i^t - T_i^{t+\Delta t}\} + \frac{\Delta H_s \Delta f_s}{C_p}$$

$$T_i^{t+\Delta t}\{4Fo + 1\} - T_{i+1}^{t+\Delta t}\{4Fo\} = \{T_i^t\} + \frac{\Delta H_s \Delta f_s}{C_p}$$

$$T_i^{t+\Delta t} \left\{1 + \frac{1}{4Fo}\right\} - T_{i+1}^{t+\Delta t} = \left\{\frac{T_i^t}{4Fo}\right\} + \frac{\Delta H_s \Delta f_s}{4Fo C_p}$$

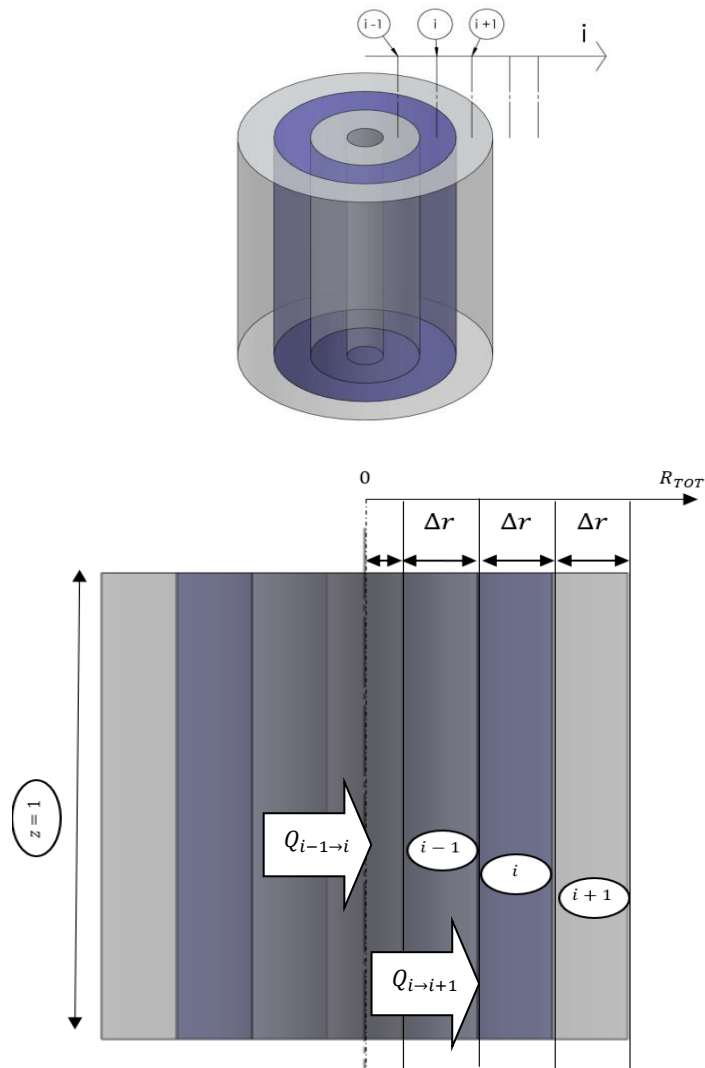


Figura A2.4 Representación de transferencia en el nodo en el seno del metal.

$$R_i = i\Delta r$$

$$V = 2\pi i\Delta r^2 * 1$$

$$A_{INT} = 2\pi\Delta r \left(i - \frac{1}{2}\right) * 1$$

$$A_{EXT} = 2\pi\Delta r \left(i + \frac{1}{2}\right) * 1$$

$$\text{Distancia} = \Delta r$$

$$Q_{i-1 \rightarrow i} + Q_{i \rightarrow i+1} = \rho V C_p \frac{\{T_i^t - T_i^{t+\Delta t}\}}{\Delta t} + m \frac{\Delta H_s \Delta f_s}{\Delta t}$$

$$Q_{i-1 \rightarrow i} = -k A_{INT} \frac{\{T_{i-1}^{t+\Delta t} - T_i^{t+\Delta t}\}}{\Delta r} \quad Q_{i+1 \rightarrow i} = -k A_{EXT} \frac{\{T_{i+1}^{t+\Delta t} - T_i^{t+\Delta t}\}}{\Delta r}$$

$$k A_{INT} \frac{\{T_i^{t+\Delta t} - T_{i-1}^{t+\Delta t}\}}{\Delta r} + k A_{EXT} \frac{\{T_i^{t+\Delta t} - T_{i+1}^{t+\Delta t}\}}{\Delta r} = \rho V C_p \frac{\{T_i^t - T_i^{t+\Delta t}\}}{\Delta t} + m \frac{\Delta H_s \Delta f_s}{\Delta t}$$

$$m = \rho V$$

$$k A_{INT} \frac{\{T_i^{t+\Delta t} - T_{i-1}^{t+\Delta t}\}}{\Delta r} + k A_{EXT} \frac{\{T_i^{t+\Delta t} - T_{i+1}^{t+\Delta t}\}}{\Delta r} = \rho V C_p \frac{\{T_i^t - T_i^{t+\Delta t}\}}{\Delta t} + \rho V \frac{\Delta H_s \Delta f_s}{\Delta t}$$

$$\frac{\Delta t k A_{INT} \{T_i^{t+\Delta t} - T_{i-1}^{t+\Delta t}\}}{\rho V C_p \Delta r} + \frac{\Delta t k A_{EXT} \{T_i^{t+\Delta t} - T_{i+1}^{t+\Delta t}\}}{\rho V C_p \Delta r} = \{T_i^t - T_i^{t+\Delta t}\} + \frac{\Delta H_s \Delta f_s}{C_p}$$

$$\frac{A_{INT}}{V} = \frac{2\pi\Delta r \left(i - \frac{1}{2}\right)}{2\pi i \Delta r^2} = \frac{\left(1 - \frac{1}{2i}\right)}{\Delta r}$$

$$\frac{A_{EXT}}{V} = \frac{2\pi\Delta r \left(i + \frac{1}{2}\right)}{2\pi i \Delta r^2} = \frac{\left(1 + \frac{1}{2i}\right)}{\Delta r}$$

$$\frac{\Delta t k \left(1 - \frac{1}{2i}\right) \{T_i^{t+\Delta t} - T_{i-1}^{t+\Delta t}\}}{\rho C_p \Delta r} + \frac{\Delta t k \left(1 + \frac{1}{2i}\right) \{T_i^{t+\Delta t} - T_{i+1}^{t+\Delta t}\}}{\rho C_p \Delta r} = \{T_i^t - T_i^{t+\Delta t}\} + \frac{\Delta H_s \Delta f_s}{C_p}$$

$$\alpha = \frac{k}{\rho C_p}$$

$$\alpha \Delta t \frac{\left(1 - \frac{1}{2i}\right) \{T_i^{t+\Delta t} - T_{i-1}^{t+\Delta t}\}}{\Delta r} + \alpha \Delta t \frac{\left(1 + \frac{1}{2i}\right) \{T_i^{t+\Delta t} - T_{i+1}^{t+\Delta t}\}}{\Delta r} = \{T_i^t - T_i^{t+\Delta t}\} + \frac{\Delta H_s \Delta f_s}{C_p}$$

$$F_o = \frac{\alpha \Delta t}{\Delta r^2}$$

$$F_o \left(1 - \frac{1}{2i}\right) \{T_i^{t+\Delta t} - T_{i-1}^{t+\Delta t}\} + F_o \left(1 + \frac{1}{2i}\right) \{T_i^{t+\Delta t} - T_{i+1}^{t+\Delta t}\} = \{T_i^t - T_i^{t+\Delta t}\} + \frac{\Delta H_s \Delta f_s}{C_p}$$

$$T_i^{t+\Delta t} \left\{F_o \left(1 - \frac{1}{2i}\right) + F_o \left(1 + \frac{1}{2i}\right) + 1\right\} - T_{i-1}^{t+\Delta t} \left\{F_o \left(1 - \frac{1}{2i}\right)\right\} - T_{i+1}^{t+\Delta t} \left\{F_o \left(1 + \frac{1}{2i}\right)\right\} = \{T_i^t\} + \frac{\Delta H_s \Delta f_s}{C_p}$$

$$T_i^{t+\Delta t} \{2F_o + 1\} - T_{i-1}^{t+\Delta t} \left\{F_o \left(1 - \frac{1}{2i}\right)\right\} - T_{i+1}^{t+\Delta t} \left\{F_o \left(1 + \frac{1}{2i}\right)\right\} = \{T_i^t\} + \frac{\Delta H_s \Delta f_s}{C_p}$$

$$T_i^{t+\Delta t} \left\{ 2 + \frac{1}{Fo} \right\} - T_{i-1}^{t+\Delta t} \left\{ 1 - \frac{1}{2i} \right\} - T_{i+1}^{t+\Delta t} \left\{ 1 + \frac{1}{2i} \right\} = \left\{ \frac{T_i^t}{Fo} \right\} + \frac{\Delta H_s \Delta f_s}{Fo C_p}$$

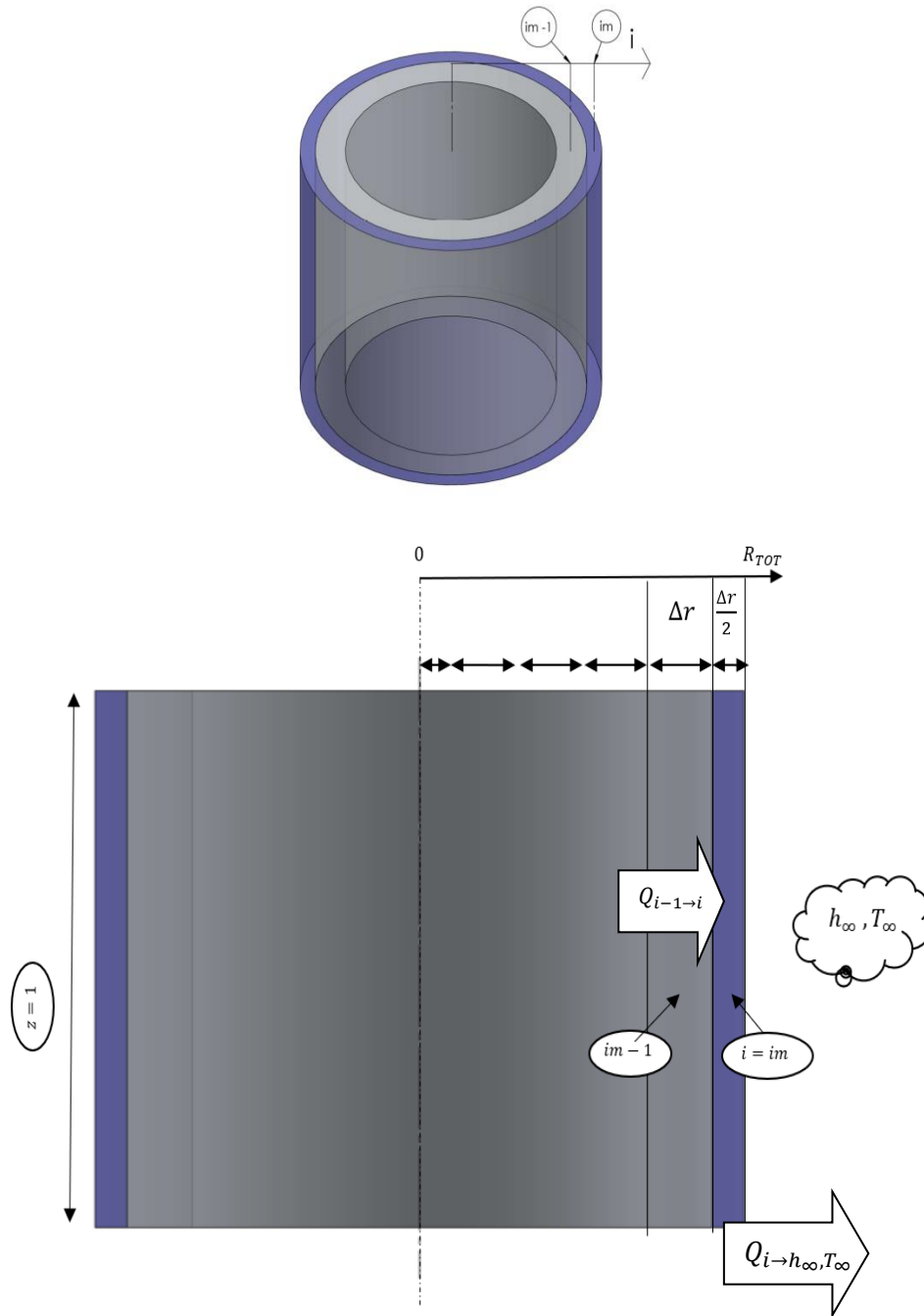


Figura A2.5 Representación de transferencia en el nodo convectivo.

$$V = 2\pi \left(i \Delta r * \frac{\Delta r}{2} \right) * 1 = \pi i \Delta r^2$$

$$A_{INT} = 2\pi\Delta r \left(i - \frac{1}{2}\right) * 1$$

$$A_{EXT} = 2\pi i\Delta r * 1$$

$$Q_{i-1 \rightarrow i} + Q_{i \rightarrow h_{\infty}, T_{\infty}} = \rho V C_p \frac{\{T_i^t - T_i^{t+\Delta t}\}}{\Delta t} + m \frac{\Delta H_s \Delta f_s}{\Delta t}$$

$$Q_{i-1 \rightarrow i} = -k A_{INT} \frac{\{T_{i-1}^{t+\Delta t} - T_i^{t+\Delta t}\}}{\Delta r} \quad Q_{i \rightarrow h_{\infty}, T_{\infty}} = -h_{\infty} A_{EXT} \{T_{\infty} - T_i^{t+\Delta t}\}$$

$$k A_{INT} \frac{\{T_i^{t+\Delta t} - T_{i-1}^{t+\Delta t}\}}{\Delta r} + h_{\infty} A_{EXT} \{T_i^{t+\Delta t} - T_{\infty}\} = \rho V C_p \frac{\{T_i^t - T_i^{t+\Delta t}\}}{\Delta t} + \rho V \frac{\Delta H_s \Delta f_s}{\Delta t}$$

$$k A_{INT} \frac{\{T_i^{t+\Delta t} - T_{i-1}^{t+\Delta t}\}}{\Delta r} + h_{\infty} A_{EXT} \{T_i^{t+\Delta t} - T_{\infty}\} = \rho V C_p \frac{\{T_i^t - T_i^{t+\Delta t}\}}{\Delta t} + \rho V \frac{\Delta H_s \Delta f_s}{\Delta t}$$

$$\frac{\Delta t k A_{INT} \{T_i^{t+\Delta t} - T_{i-1}^{t+\Delta t}\}}{\rho V C_p \Delta r} + \frac{\Delta t h_{\infty} A_{EXT} \{T_i^{t+\Delta t} - T_{\infty}\}}{\rho V C_p} = \{T_i^t - T_i^{t+\Delta t}\} + \frac{\Delta H_s \Delta f_s}{C_p}$$

$$\frac{A_{INT}}{V} = \frac{2\pi\Delta r \left(i - \frac{1}{2}\right)}{\pi i \Delta r^2} = \frac{2 \left(1 - \frac{1}{2i}\right)}{\Delta r}$$

$$\frac{A_{EXT}}{V} = \frac{2\pi i \Delta r}{\pi i \Delta r^2} = \frac{2}{\Delta r}$$

$$\frac{\Delta t k}{\rho C_p} \frac{2 \left(1 - \frac{1}{2i}\right)}{\Delta r} \frac{\{T_i^{t+\Delta t} - T_{i-1}^{t+\Delta t}\}}{\Delta r} + \frac{\Delta t h_{\infty}}{\rho C_p} \frac{2}{\Delta r} \{T_i^{t+\Delta t} - T_{\infty}\} = \{T_i^t - T_i^{t+\Delta t}\} + \frac{\Delta H_s \Delta f_s}{C_p}$$

$$2Fo \{T_i^{t+\Delta t} - T_{i-1}^{t+\Delta t}\} + \frac{\Delta t h_{\infty}}{\rho C_p} \frac{2}{\Delta r} \{T_i^{t+\Delta t} - T_{\infty}\} = \{T_i^t - T_i^{t+\Delta t}\} + \frac{\Delta H_s \Delta f_s}{C_p}$$

$$Bi * Fo = \frac{k \Delta t}{\rho C_p \Delta r^2} \frac{h_{\infty} \Delta r}{k} = \frac{\Delta t h_{\infty}}{\rho C_p \Delta r}$$

$$2Fo \{T_i^{t+\Delta t} - T_{i-1}^{t+\Delta t}\} + 2 Bi Fo \{T_i^{t+\Delta t} - T_{\infty}\} = \{T_i^t - T_i^{t+\Delta t}\} + \frac{\Delta H_s \Delta f_s}{C_p}$$

$$T_i^{t+\Delta t} \{2Fo + 2Bi Fo + 1\} - T_{i-1}^{t+\Delta t} \{2Fo\} - T_{\infty} \{2Bi Fo\} = \{T_i^t\} + \frac{\Delta H_s \Delta f_s}{C_p}$$

$$T_i^{t+\Delta t} \left\{1 + Bi + \frac{1}{2Fo}\right\} - T_{i-1}^{t+\Delta t} - T_{\infty} \{Bi\} = \left\{\frac{T_i^t}{2Fo}\right\} + \frac{\Delta H_s \Delta f_s}{2Fo C_p}$$

Ecuaciones nodales:

Tipo	Ecuación
Adiabático	$\left\{ \frac{T_i^t}{4Fo} \right\} + \frac{\Delta H_s \Delta f_s}{4Fo C_p} = T_i^{t+\Delta t} \left\{ 1 + \frac{1}{4Fo} \right\} - T_{i+1}^{t+\Delta t}$
Seno de metal	$\left\{ \frac{T_i^t}{Fo} \right\} + \frac{\Delta H_s \Delta f_s}{Fo C_p} = T_i^{t+\Delta t} \left\{ 2 + \frac{1}{Fo} \right\} - T_{i-1}^{t+\Delta t} \left\{ 1 - \frac{1}{2i} \right\} - T_{i+1}^{t+\Delta t} \left\{ 1 + \frac{1}{2i} \right\}$
Convectivo	$\left\{ \frac{T_i^t}{2Fo} \right\} + \frac{\Delta H_s \Delta f_s}{2Fo C_p} = T_i^{t+\Delta t} \left\{ 1 + Bi + \frac{1}{2Fo} \right\} - T_{i-1}^{t+\Delta t} - T_\infty \{ Bi \}$

ANEXO III. RESULTADOS DE COMPOSICIÓN DE CADA EXPERIMENTO.

Program: AL-011
 Comment: FACULTAD DE QUIMICA UNAM TRABAJO GLOBAL
 Single spark(s) 11/12/2013 01:15:25 PM
 Elements: Concentration

Muestra No.: Prueba 3
 Usuario: Dr Carlos Gonzalez
 Comentarios: Modifica Sr

Quality:
 Analista: M Morua A Amaro

No	Si	Fe	Cu	Mn	Mg	Zn	Ni	Cr	Pb
	%	%	%	%	%	%	%	%	%
1	12.85	0.2611	0.0462	0.0093	<0.0050	2.711	0.0032	0.0012	<0.0020
2	12.65	0.2448	0.0449	0.0091	<0.0050	2.899	0.0030	0.0012	<0.0020
3	12.65	0.2454	0.0450	0.0095	<0.0050	3.125	0.0035	0.0018	0.0023

No	Ti	V	Co	Sr	Al
	%	%	%	%	%
1	0.0381	0.0104	<0.0020	0.0210	<84.0
2	0.0366	0.0087	<0.0020	0.0192	84.1
3	0.0377	0.0100	<0.0020	0.0190	83.9

Program: AL-011
 Comment: FACULTAD DE QUIMICA UNAM TRABAJO GLOBAL
 Average (n=3) 11/12/2013 01:15:25 PM
 Elements: Concentration

Muestra No.: Prueba 3
 Usuario: Dr Carlos Gonzalez
 Comentarios: Modifica Sr

Quality:
 Analista: M Morua A Amaro

	Si	Fe	Cu	Mn	Mg	Zn	Ni	Cr	Pb
	%	%	%	%	%	%	%	%	%
-	12.72	0.2505	0.0454	0.0093	<0.0050	2.911	0.0032	0.0014	<0.0020

	Ti	V	Co	Sr	Al
	%	%	%	%	%
-	0.0375	0.0097	<0.0020	0.0197	<84.0

Figura A3.1. Resultado de la composición química del baño liquido de la aleación Aluminio silicio.

Program AL-011
 Comment: FACULTAD DE QIMICA UNAM TRABAJO GLOBAL
 Single spark(s) 20/05/2015 12:11:21 PM
 Elements: Concentration

Muestra No: Prueba 4
 Usuario: Dr Carlos Gonzalez
 Comentarios: Estudio de posgrado

Quality:
 Analista: M.Morua, A. Amaro

No	Si	Fe	Cu	Mn	Mg	Zn	Ni	Cr	Pb
	%	%	%	%	%	%	%	%	%
1	0.0124	0.2615	33.15	0.0093	<0.0050	0.493	0.0033	0.0011	0.0020
2	0.0112	0.2609	33.14	0.0920	<0.0050	0.398	0.0031	0.0011	<0.0020
3	0.0112	0.2684	33.18	0.0280	0.3790	0.781	0.0284	0.0071	0.0140

No	Ti	V	Co	Sr	Al
	%	%	%	%	%
1	0.0343	0.0079	0.0020	0.0001	64.1
2	0.0337	0.0075	0.0020	0.0001	64.1
3	0.0482	0.010	0.0298	0.0015	<63.4

Program AL-011
 Comment: FACULTAD DE QIMICA UNAM TRABAJO GLOBAL
 Single spark(s) 20/05/2015 12:11:21 PM
 Elements: Concentration

Muestra No: Prueba 4
 Usuario: Dr Carlos Gonzalez
 Comentarios: Estudio de posgrado

Quality:
 Analista: M.Morua, A. Amaro

	Si	Fe	Cu	Mn	Mg	Zn	Ni	Cr	Pb
	%	%	%	%	%	%	%	%	%
-	0.0116	0.2636	33.16	0.0431	0.0134	0.557	0.0116	0.0031	0.0060

	Ti	V	Co	Sr	Al
	%	%	%	%	%
-	0.0387	0.0085	0.0096	0.0006	<65.9

Figura A3.2. Resultado de la composición química del baño liquido de la aleación Aluminio cobre.

Program Al-011										18/06/2014 13:12:40 PM	
Comment: FACULTAD DE QIMICA UNAM TRABAJO GLOBAL											
Sigle spark(s)										Elements: Concentration	
Muestra No: Prueba 6 ni					Quality:						
Usuario: Dr Carlos Gonzalez					Analista: M.Morua, A. Amaro						
Comentarios: Estudio de posgrado											
No	Si	Fe	Cu	Mn	Mg	Zn	Ni	Cr	Pb		
	%	%	%	%	%	%	%	%	%	%	
1	0.0129	0.2675	0.0474	0.0093	<0.0050	0.6850	5.77	0.0014	0.0024		
2	0.0167	0.2595	0.0472	0.0093	<0.0050	0.8470	5.70	0.0013	<0.0020		
3	0.0117	0.2664	0.0443	0.0145	<0.0050	0.8270	5.71	0.0033	0.0022		
No	Ti	V	Co	Sr	Al						
	%	%	%	%	%						
1	0.0380	0.103	<0.0020	0.0010	<93.3						
2	0.0367	0.0093	<0.0020	0.0010	93.2						
3	0.0367	0.302	0.0092	0.0012	<93.2						
Program Al-011										18/06/2014 13:12:40 PM	
Comment: FACULTAD DE QIMICA UNAM TRABAJO GLOBAL											
Sigle spark(s)										Elements: Concentration	
Muestra No: Prueba 6 ni					Quality:						
Usuario: Dr Carlos Gonzalez					Analista: M.Morua, A. Amaro						
Comentarios: Estudio de posgrado											
	Si	Fe	Cu	Mn	Mg	Zn	Ni	Cr	Pb		
	%	%	%	%	%	%	%	%	%	%	
-	x	0.0138	0.2645	0.0463	0.110	<0.0050	0.7863	5.73	0.0020	0.0022	
	Ti	V	Co	Sr	Al						
	%	%	%	%	%						
-	x	0.0371	0.0166	0.0028	0.0011	<93.2					

Figura A3.3. Resultado de la composición química del baño liquido de la aleación Aluminio níquel.

Program Al-011										05/03/2015 11:05:05 PM	
Comment: FACULTAD DE QIMICA UNAM TRABAJO GLOBAL											
Sigle spark(s)										Elements: Concentration	
Muestra No: Prueba 3 cu					Quality:						
Usuario: Dr Carlos Gonzalez					Analista: M.Morua, A. Amaro						
Comentarios: Estudio de posgrado											
No	Si	Fe	Cu	Mn	Mg	Zn	Ni	Cr	Pb		
	%	%	%	%	%	%	%	%	%	%	
1	0.0213	0.4197	2.941	0.1392	0.2049	0.1265	0.0790	0.0124	0.0027		
2	0.1123	0.4017	3.146	0.1363	0.1984	0.1262	0.0171	0.0123	<0.0253		
3	0.0104	0.4007	2.941	0.1383	0.2032	0.1278	0.0176	0.0123	0.0261		
No	Ti	V	Co	Sr	Al						
	%	%	%	%	%						
1	0.0608	0.0100	0.0020	0.0014	96.1						
2	0.0618	0.0100	0.0020	0.0013	95.9						
3	0.0615	0.0097	0.0020	0.0012	96.2						
Program Al-011										05/03/2015 11:05:05 PM	
Comment: FACULTAD DE QIMICA UNAM TRABAJO GLOBAL											
Sigle spark(s)										Elements: Concentration	
Muestra No: Prueba 3 cu					Quality:						
Usuario: Dr Carlos Gonzalez					Analista: M.Morua, A. Amaro						
Comentarios: Estudio de posgrado											
	Si	Fe	Cu	Mn	Mg	Zn	Ni	Cr	Pb		
	%	%	%	%	%	%	%	%	%	%	
-	x	0.0480	0.4074	3.009	0.1379	0.2022	0.1268	0.0379	0.0123	0.0180	
	Ti	V	Co	Sr	Al						
	%	%	%	%	%						
-	x	0.0614	0.0099	<0.0020	0.0013	96.1					

Figura A3.4. Resultado de la composición química del baño liquido de la aleación Aluminio cobre 3%.

Program AI-011										05/03/2015 13:10:08 PM
Comment: FACULTAD DE QIMICA UNAM TRABAJO GLOBAL										
Sigle spark(s)										Elements: Concentration
Muestra No: Prueba7 cu					Quality:					
Usuario: Dr Carlos Gonzalez					Analista: M.Morua, A. Amaro					
Comentarios: Estudio de posgrado										
No	Si	Fe	Cu	Mn	Mg	Zn	Ni	Cr	Pb	
	%	%	%	%	%	%	%	%	%	%
1	0.1281	0.1298	4.155	0.0916	0.0230	0.0160	0.0117	0.0159	<0.0020	
2	0.1262	0.1263	4.048	0.0938	0.0229	0.0157	0.0114	0.0164	<0.0020	
3	0.1274	0.1448	4.112	0.0930	0.0248	0.0165	0.0097	0.0133	<0.0020	
No	Ti	V	Co	Sr	Al					
	%	%	%	%	%					
1	0.0152	0.0097	<0.0020	0.0027	95.5					
2	0.0155	0.0101	<0.0020	0.0026	95.6					
3	0.0148	0.0095	<0.0020	0.0029	<95.5					
Program AI-011										05/03/2015 13:10:08 PM
Comment: FACULTAD DE QIMICA UNAM TRABAJO GLOBAL										
Sigle spark(s)										Elements: Concentration
Muestra No: Prueba7cu i					Quality:					
Usuario: Dr Carlos Gonzalez					Analista: M.Morua, A. Amaro					
Comentarios: Estudio de posgrado										
	Si	Fe	Cu	Mn	Mg	Zn	Ni	Cr	Pb	
	%	%	%	%	%	%	%	%	%	%
\bar{x}	0.1273	0.1337	4.105	0.0928	0.0236	0.0161	0.0109	0.0152	<0.0020	
	Ti	V	Co	Sr	Al					
	%	%	%	%	%					
\bar{x}	0.0152	0.0092	<0.0020	0.0027	95.5					

Figura A3.5. Resultado de la composición química del baño liquido de la aleación Aluminio cobre 4%.

Program AI-011										05/03/2015 17:21:25 PM
Comment: FACULTAD DE QIMICA UNAM TRABAJO GLOBAL										
Sigle spark(s)										Elements: Concentration
Muestra No: Prueba15 cu					Quality:					
Usuario: Dr Carlos Gonzalez					Analista: M.Morua, A. Amaro					
Comentarios: Estudio de posgrado										
No	Si	Fe	Cu	Mn	Mg	Zn	Ni	Cr	Pb	
	%	%	%	%	%	%	%	%	%	%
1	0.0610	0.1295	5.001	0.0050	0.0082	0.0434	0.0032	0.0025	0.0022	
2	0.0486	0.1129	5.011	0.0049	0.0052	0.0863	0.0030	0.0024	<0.0020	
3	0.1309	0.1360	5.102	0.0197	0.0097	0.0796	0.0031	0.0034	0.0027	
No	Ti	V	Co	Sr	Al					
	%	%	%	%	%					
1	0.0043	0.0134	<0.0020	0.0002	<97.8					
2	0.0039	0.0128	<0.0020	0.0002	94.7					
3	0.0053	0.0135	<0.0020	0.0002	<94.5					
Program AI-011										05/03/2015 17:21:25 PM
Comment: FACULTAD DE QIMICA UNAM TRABAJO GLOBAL										
Sigle spark(s)										Elements: Concentration
Muestra No: Prueba15 cu					Quality:					
Usuario: Dr Carlos Gonzalez					Analista: M.Morua, A. Amaro					
Comentarios: Estudio de posgrado										
	Si	Fe	Cu	Mn	Mg	Zn	Ni	Cr	Pb	
	%	%	%	%	%	%	%	%	%	%
\bar{x}	0.0802	0.1261	5.038	0.0099	0.0077	0.0698	0.0031	0.0027	0.0023	
	Ti	V	Co	Sr	Al					
	%	%	%	%	%					
\bar{x}	0.0045	0.0132	<0.00020	0.0002	<94.7					

Figura A3.6. Resultado de la composición química del baño liquido de la aleación Aluminio cobre 5%.

ANEXO IV. DATOS DE DENSIDAD DE GRANO DE CADA EXPERIMENTO.

El procedimiento utilizado para determinar la densidad volumétrica de los granos en los diferentes experimentos fue: 1) medir el diámetro de la muestra, 2) trazar una línea del centro a la orilla de la muestra, 3) medir el diámetro de los granos que se encuentren sobre la línea
4) calcular la densidad de granos mediante la relación estereográfica:

$$N_V = 0.87 * (N_A)^{\frac{3}{2}} \quad (A11)$$

Donde N_V es la densidad volumétrica de granos y N_A la densidad por área de granos. Al considerarse la geometría esférica de los granos y una base de cálculo de 1m^2 circular se determina la densidad de granos por unidad de área. La tabla A3.1 muestra los datos medidos del diámetro promedio de los granos, así como la densidad de granos por unidad de área y de volumen.

Tabla A3.1. Diámetro y densidad de granos obtenidos en cada experimento.

Aleación	Flujo	Muestra	Diámetro promedio de granos (mm)	Densidad de granos por volumen (#Granos m^{-3})
Al-Si	75	B1	1.02	1.17×10^9
		B2	1.02	1.16×10^9
		B3	1.00	1.25×10^9
		promedio	1.02	1.19×10^9
	100	M1	0.80	2.41×10^9
		M2	0.75	2.96×10^9
		M3	0.78	2.68×10^9
		promedio	0.78	2.68×10^9
	150	A1	0.57	6.51×10^9
		A2	0.56	7.29×10^9
		A3	0.58	6.51×10^9
		promedio	0.57	6.77×10^9
Al-Cu	75	B1	1.32	5.39×10^8
		B2	1.36	4.93×10^8
		B3	1.36	4.93×10^8
		promedio	1.35	5.08×10^8
	100	M1	1.05	1.09×10^9
		M2	1.02	1.17×10^9
		M3	1.00	1.25×10^9

		promedio	1.02	1.16×10^9
	150	A1	0.63	5.12×10^9
		A2	0.58	6.26×10^9
		A3	0.57	6.76×10^9
		promedio	0.59	6.08×10^9
Al-Ni	75	B1	0.69	3.77×10^9
		B2	0.66	4.31×10^9
		B3	0.64	4.70×10^9
		promedio	0.66	4.26×10^9
	100	M1	0.55	7.56×10^9
		M2	0.54	7.84×10^9
		M3	0.54	7.84×10^9
		promedio	0.54	7.75×10^9
	150	A1	0.43	1.54×10^{10}
		A2	0.43	1.59×10^{10}
		A3	0.45	1.37×10^{10}
		promedio	0.44	1.50×10^{10}
Al 3%Cu	100	B1	0.61	5.45×10^9
		B2	0.62	5.34×10^9
		B3	0.62	5.34×10^9
		promedio	0.62	5.35×10^9
Al 4%Cu	100	M1	0.58	6.26×10^9
		M2	0.59	6.02×10^9
		M3	0.58	6.51×10^9
		promedio	0.58	6.26×10^9
Al 5%Cu	100	A1	0.55	7.29×10^9
		A2	0.57	6.76×10^9
		A3	0.61	5.56×10^9
		promedio	0.59	5.51×10^9

ANEXO V. MACROESTRUCTURAS OBTENIDAS EXPERIMENTALMENTE

A continuación, se presentan las microestructuras de cada baño líquido de los cuales se obtuvieron los experimentos presentados en esta tesis. Las muestras fueron cortadas en tres partes, la parte superior se eliminó, la media se utilizó para determinar la posición de los termopares y en la otra cara se tomaron imágenes para la microestructura, la última parte se utilizó para obtener las macroestructuras.

En la Figura A4.1 se encuentran las imágenes tomadas a la mitad del radio de cada muestra. Cabe mencionar que las imágenes de microestructuras fueron tomadas a 100X, mientras que la estructura es escala real.

Tabla A5.1. Macroestructuras obtenidas de Aluminio-Silicio de composición eutéctica.

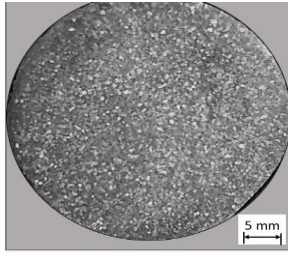
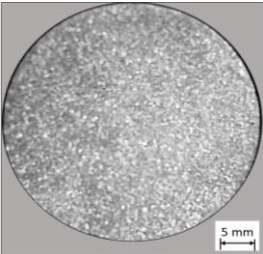
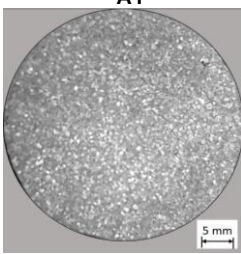
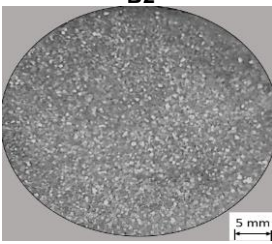
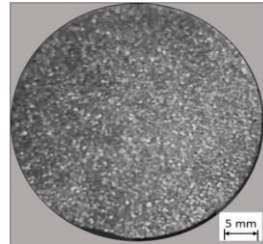
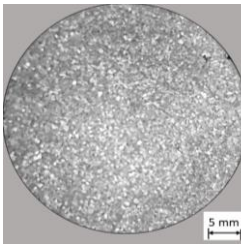
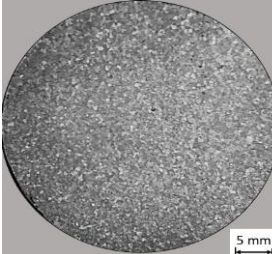
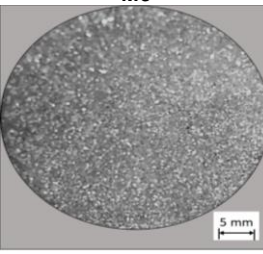
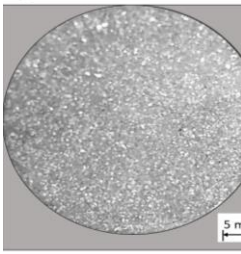
75 L/min	100 L/min	150 L/min
B1 	M1 	A1 
B2 	M2 	A2 
B3 	M3 	A3 

Tabla A5.2. Macroestructuras obtenidas de Aluminio-Cobre de composición eutéctica.

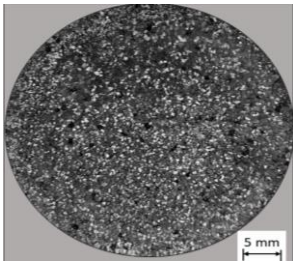
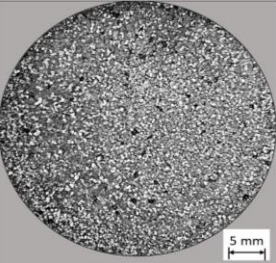
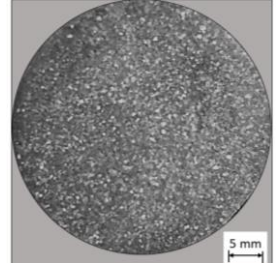
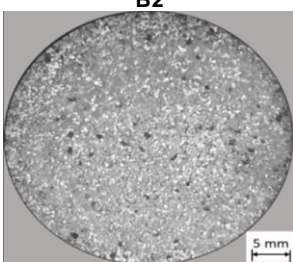
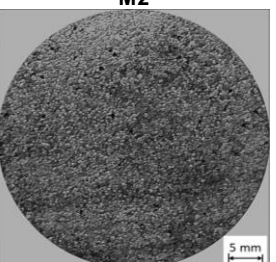
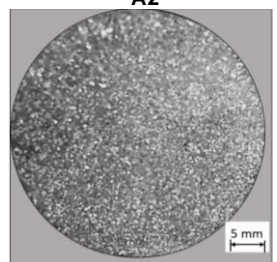
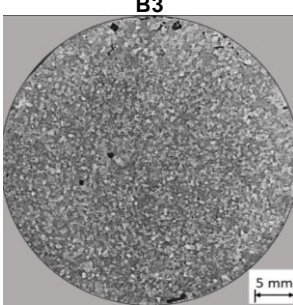
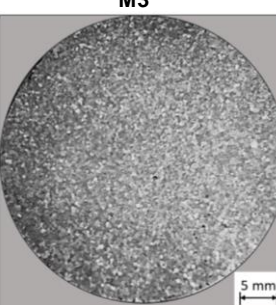
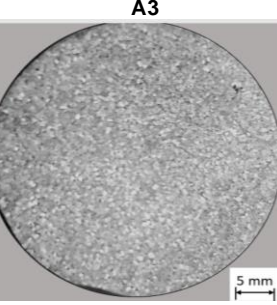
75 L/min	100 L/min	150 L/min
<p style="text-align: center;">B1</p> 	<p style="text-align: center;">M1</p> 	<p style="text-align: center;">A1</p> 
<p style="text-align: center;">B2</p> 	<p style="text-align: center;">M2</p> 	<p style="text-align: center;">A2</p> 
<p style="text-align: center;">B3</p> 	<p style="text-align: center;">M3</p> 	<p style="text-align: center;">A3</p> 

Tabla A5.3. Macroestructuras obtenidas de Aluminio-Níquel de composición eutéctica.

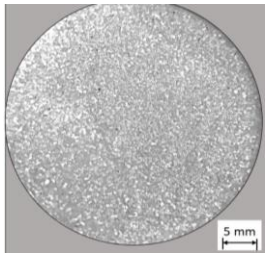
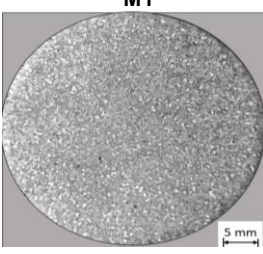
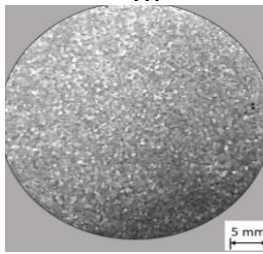
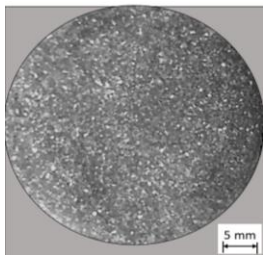
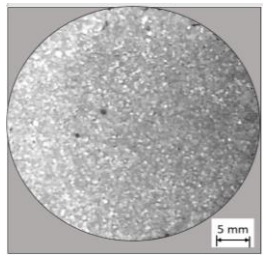
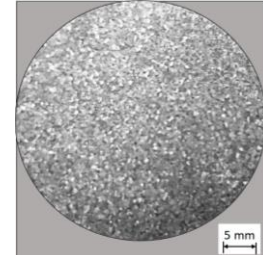
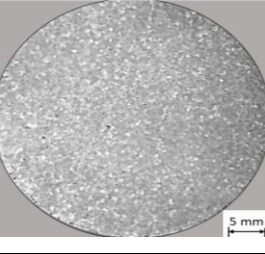
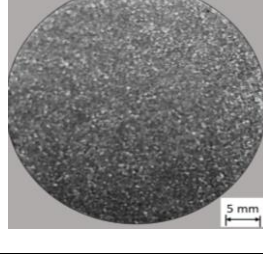
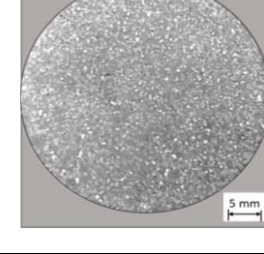
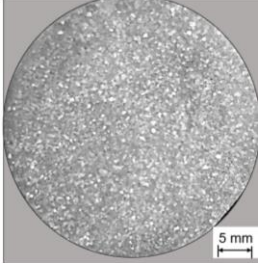
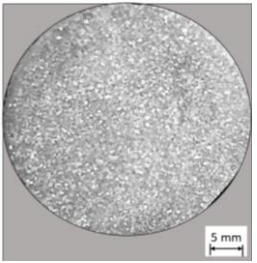
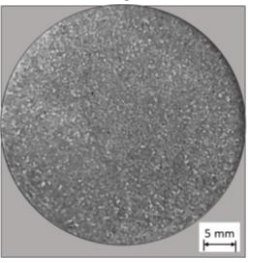
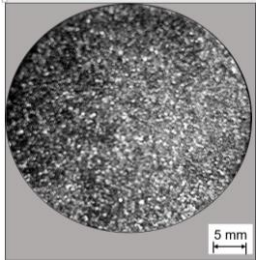
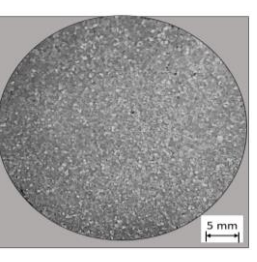
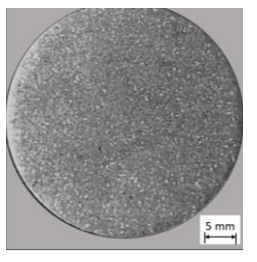
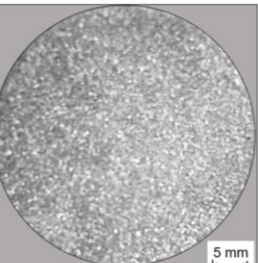
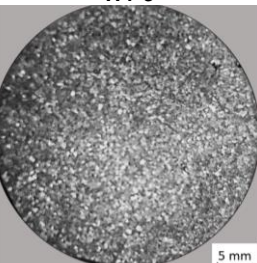
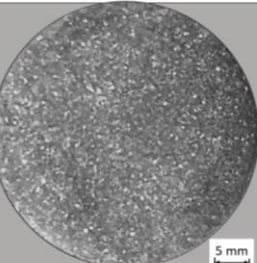
75 L/min	100 L/min	150 L/min
<p>B1</p> 	<p>M1</p> 	<p>A1</p> 
<p>B2</p> 	<p>M2</p> 	<p>A2</p> 
<p>B3</p> 	<p>M3</p> 	<p>A3</p> 

Tabla A5.4. Macroestructuras obtenidas de aleación hipoeutécticas.

3%	4%	5%
<p data-bbox="462 367 516 394">H3-1</p> 	<p data-bbox="771 367 824 394">H4-1</p> 	<p data-bbox="1088 367 1141 394">H5-1</p> 
<p data-bbox="462 688 516 716">H3-2</p> 	<p data-bbox="771 688 824 716">H4-2</p> 	<p data-bbox="1088 688 1141 716">H5-2</p> 
<p data-bbox="462 1029 516 1056">H3-3</p> 	<p data-bbox="771 1029 824 1056">H4-3</p> 	<p data-bbox="1088 1029 1141 1056">H5-3</p> 

ANEXO VI. EVOLUCIÓN DE LA FRACCIÓN SÓLIDA.

Fourier (B) en las curvas de enfriamiento a diferente flujo de aire, en la aleación Al-Ni.

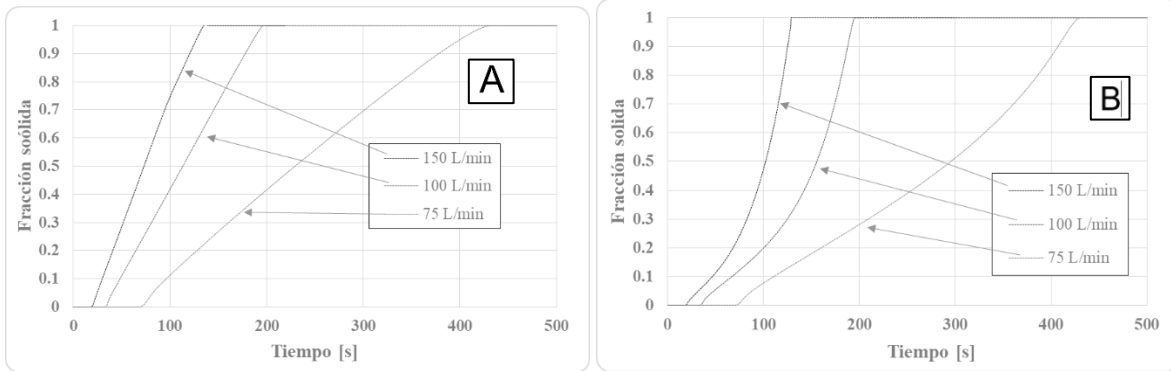


Figura A6.1. Fracción sólida en función del tiempo obtenida de la aplicación de método de Newton (A) y Fourier (B) en las curvas de enfriamiento a diferente flujo de aire, en la aleación Al-Si.

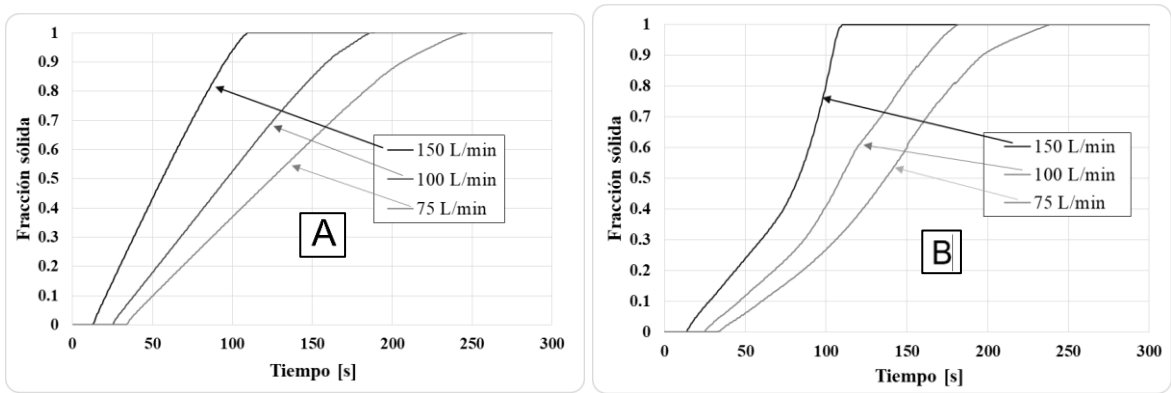


Figura A6.2. Fracción sólida en función del tiempo obtenida de la aplicación de método de Newton (A) y Fourier (B) en las curvas de enfriamiento a diferente flujo de aire, en la aleación Al-Ni.

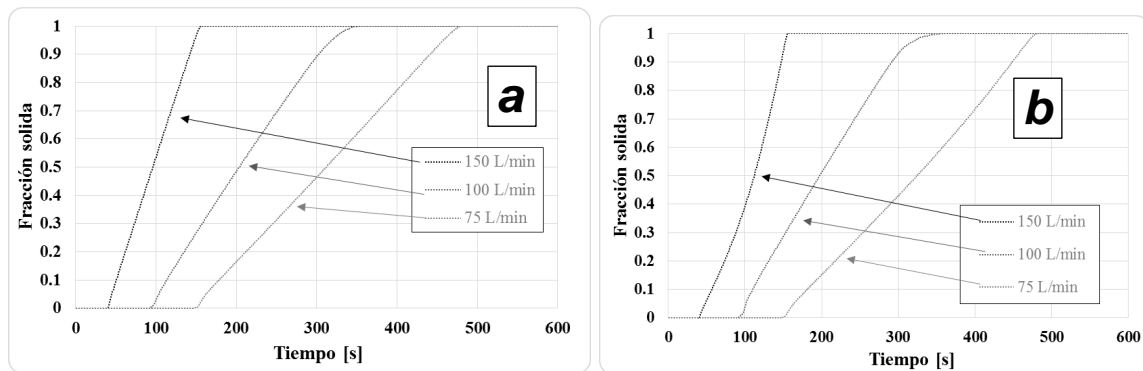


Figura A6.3. Fracción sólida en función del tiempo obtenida de la aplicación de método de Newton (a) y Fourier (b) a las curvas de enfriamiento obtenidas a diferente flujo de aire, para la aleación Al-Cu.

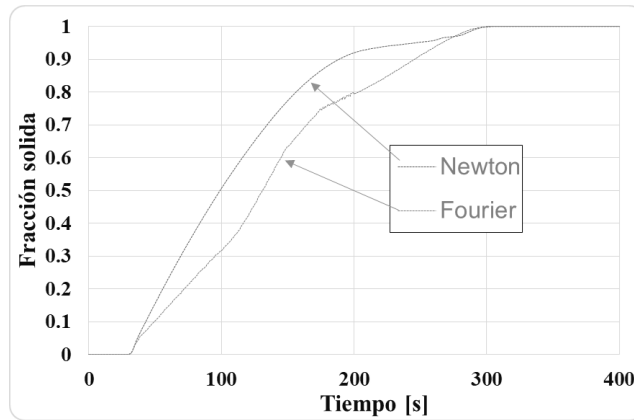


Figura A6.4. Fracción sólida en función del tiempo obtenida de la aplicación de método de Newton y Fourier en las curvas de enfriamiento con la aleación Al-Cu 3%.

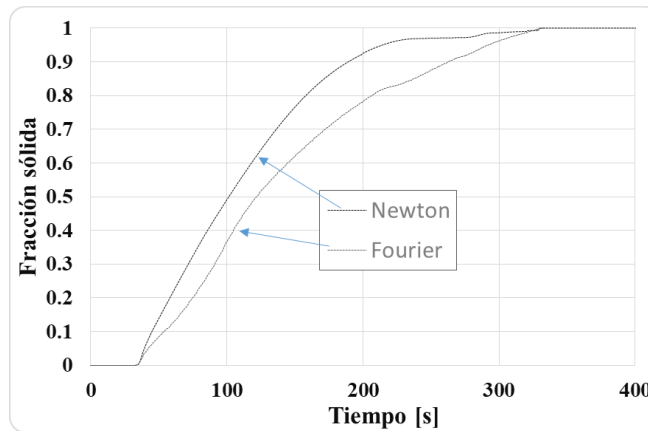


Figura A6.5. Evolución de la fracción sólida obtenida por los métodos de Newton y Fourier de la aleación aluminio con 4 % de cobre.

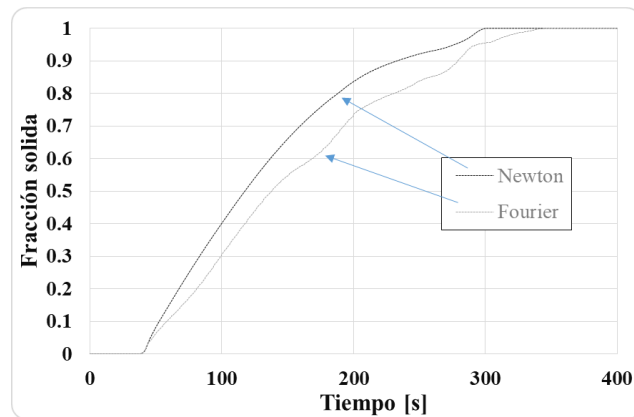


Figura A6.6. Fracción sólida en función del tiempo obtenida de la aplicación de método de Newton y Fourier en las curvas de enfriamiento con la aleación Al-Cu 5%.

ANEXO VII. EVOLUCIÓN DEL PUNTO DE COHERENCIA.

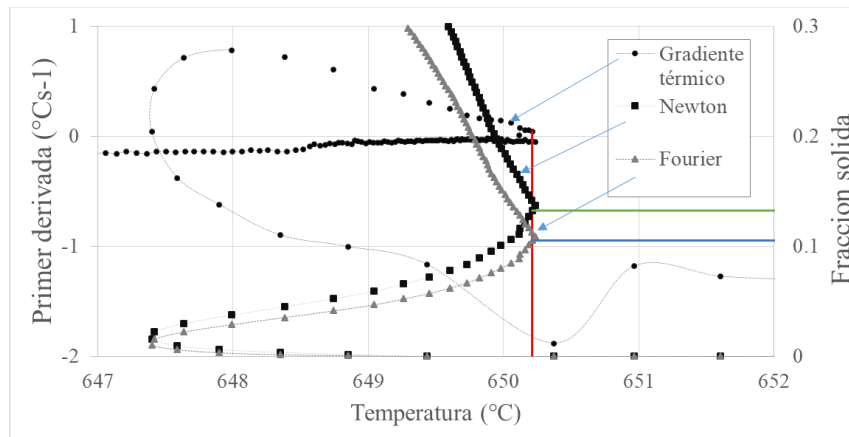


Figura A7.1. Primera derivada de la temperatura respecto al tiempo de la curva de enfriamiento de aluminio cobre al 3% y la evolución de la fracción sólida obtenida por los métodos Newton y Fourier en función de la temperatura, se muestra el rojo el punto considerado de coherencia dendrítica, en azul la coherencia dendrítica obtenida por el método de Newton y en obtenida por el método de Fourier.

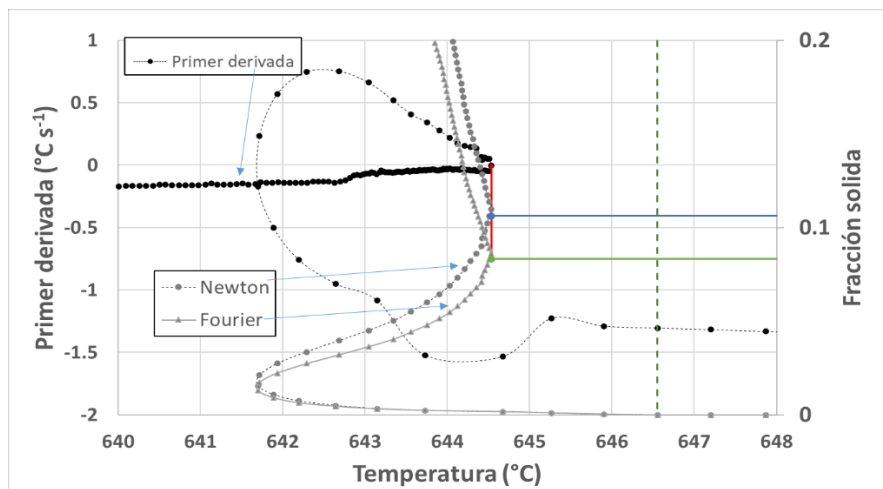


Figura A7.2. Primera derivada de la temperatura respecto al tiempo de la curva de enfriamiento de aluminio cobre al 4% y la evolución de la fracción sólida obtenida por los métodos Newton y Fourier en función de la temperatura, se muestra el rojo el punto considerado de coherencia dendrítica, en azul la coherencia dendrítica obtenida por el método de Newton y en obtenida por el método de Fourier.

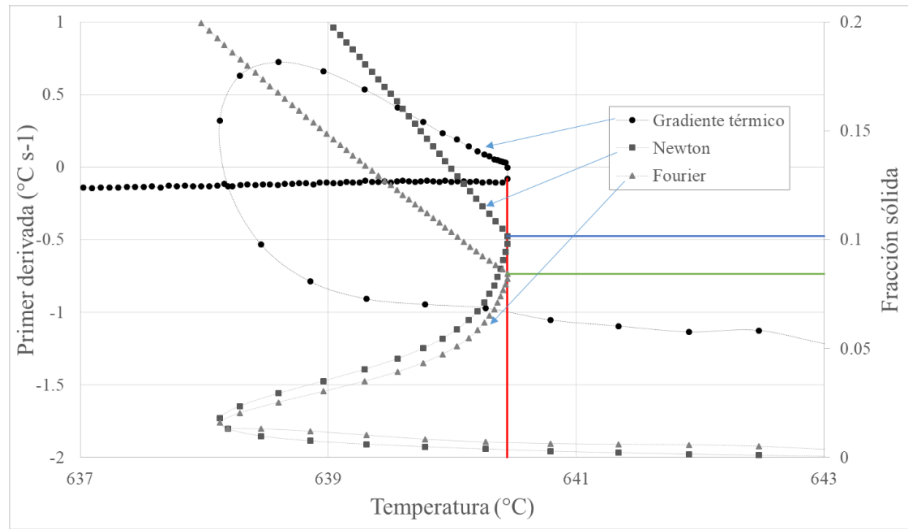


Figura A7.3. Primera derivada de la temperatura respecto al tiempo de la curva de enfriamiento de aluminio cobre al 5% y la evolución de la fracción sólida obtenida por los métodos Newton y Fourier en función de la temperatura, se muestra el rojo el punto considerado de coherencia dendrítica, en azul la coherencia dendrítica obtenida por el método de Newton y en obtenida por el método de Fourier.

ANEXO VIII. CURVAS CINÉTICAS.

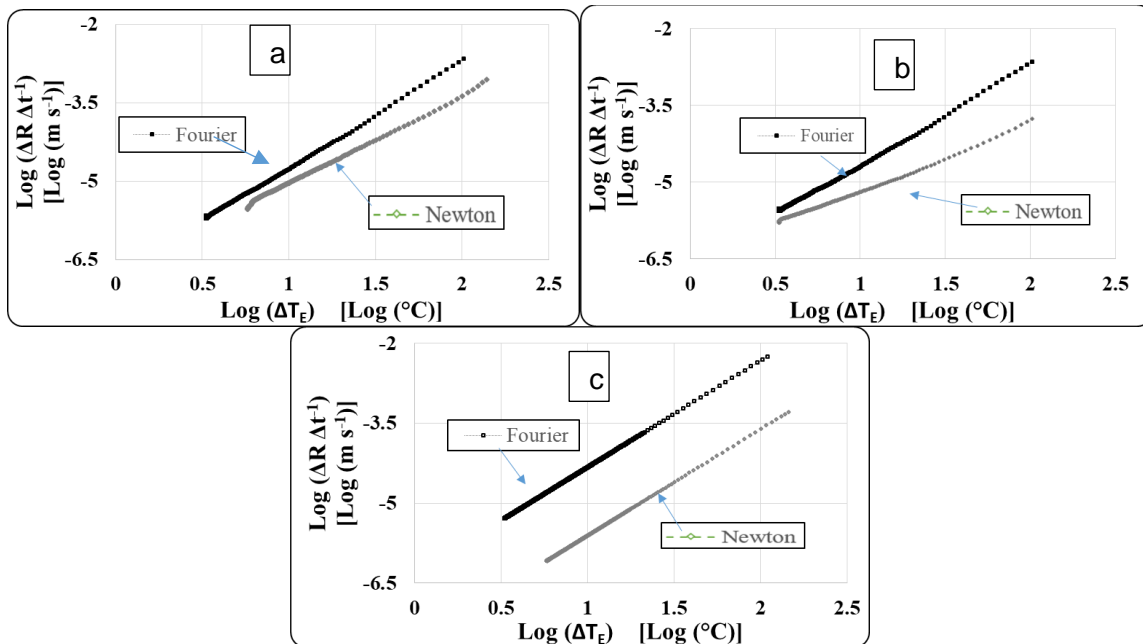


Figura A8.1. Gráficos de resultados de la aplicación de los métodos de crecimiento equiaxial eutéctico de la aleación Al Si enfriado con 75 Litros por minuto de aire dado por los métodos de Fourier y Newton. a) FG, b) Dioszegi, y c) Degand.

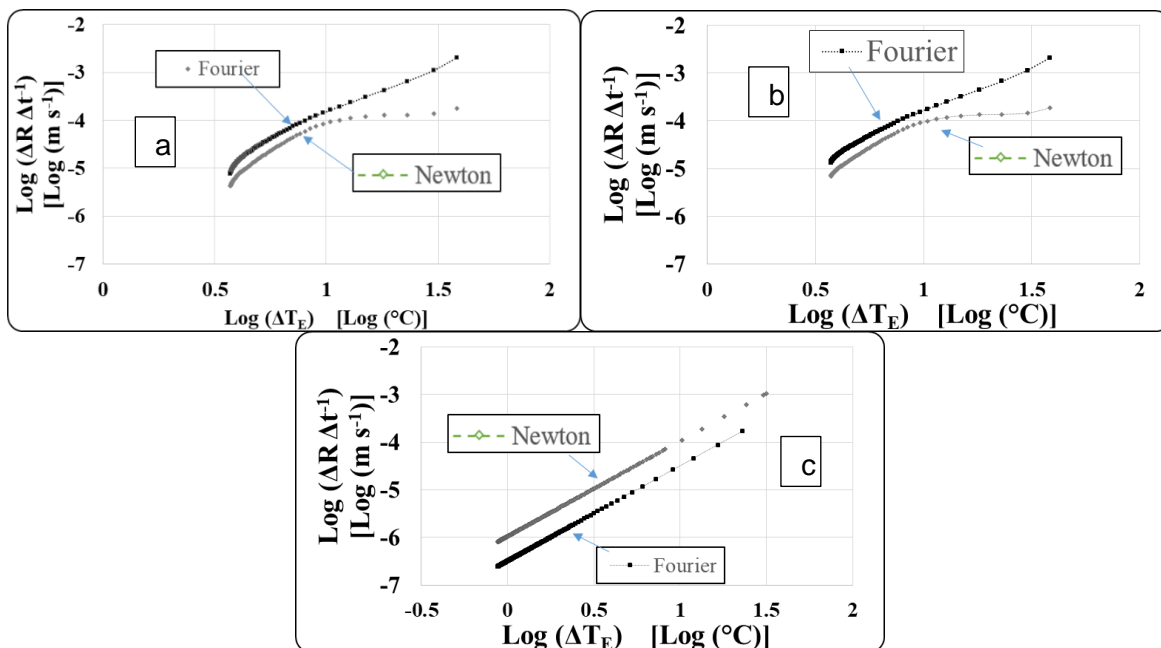


Figura A8.2. Gráficos de resultados de la aplicación de los métodos de crecimiento equiaxial eutéctico de la aleación Al Si enfriado con 100 Litros por minuto de aire dado por los métodos de Fourier y Newton. A) FG, B) Dioszegi, y C) Degand.

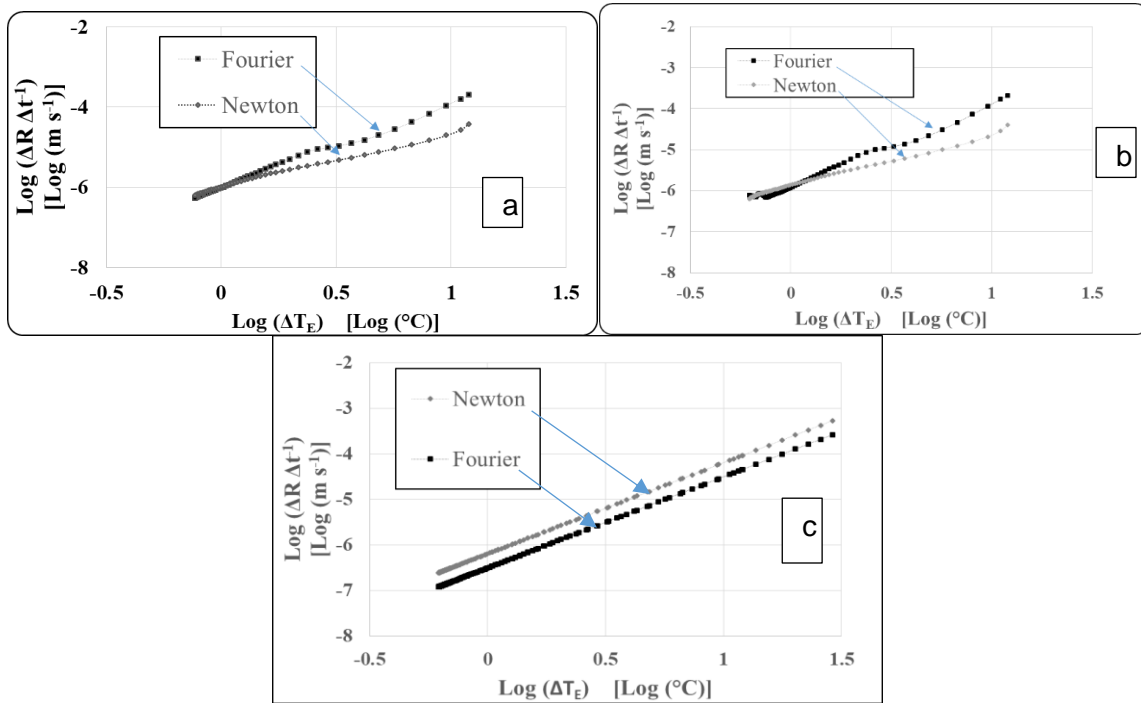


Figura A8.3. Gráficos de resultados de la aplicación de los métodos de crecimiento equiaxial eutéctico de la aleación Al Si enfriado con 150 Litros por minuto de aire dado por los métodos de Fourier y Newton. a) FG, b) Dioszegi, y c) Degand.

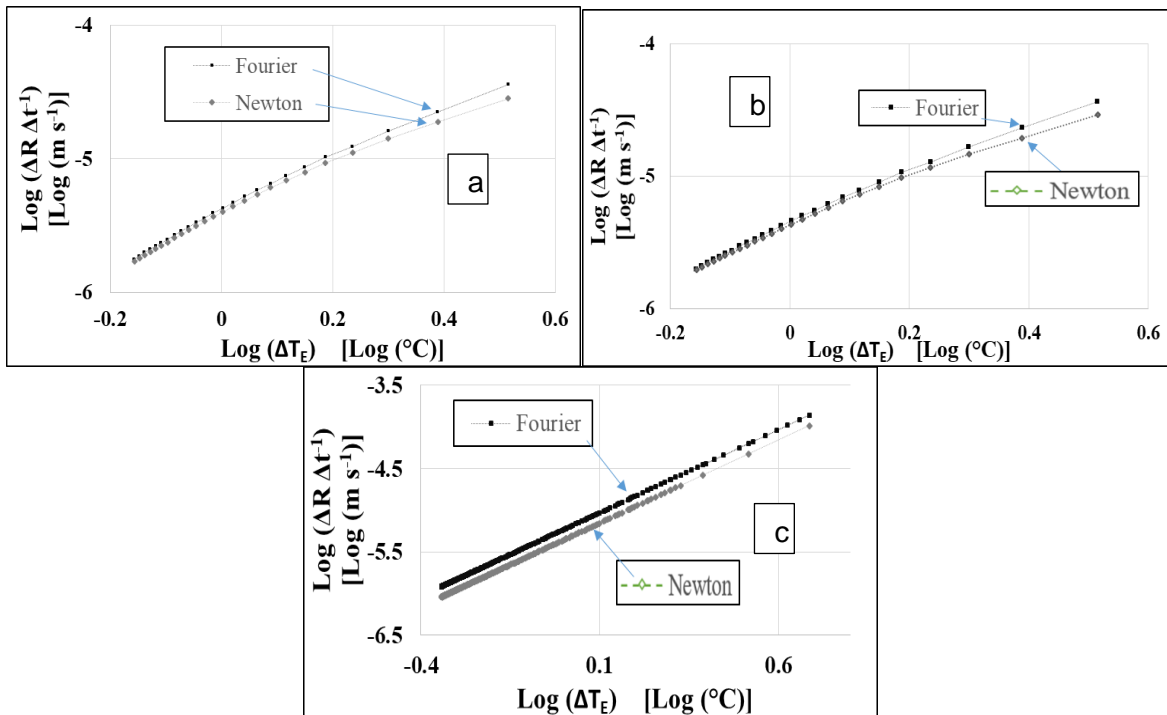


Figura A8.4. Gráficos de resultados de la aplicación de los métodos de crecimiento equiaxial eutéctico de la aleación Al Ni enfriado con 75 Litros por minuto de aire dado por los métodos de Fourier y Newton. A) FG, B) Dioszegi, y C) Degand.

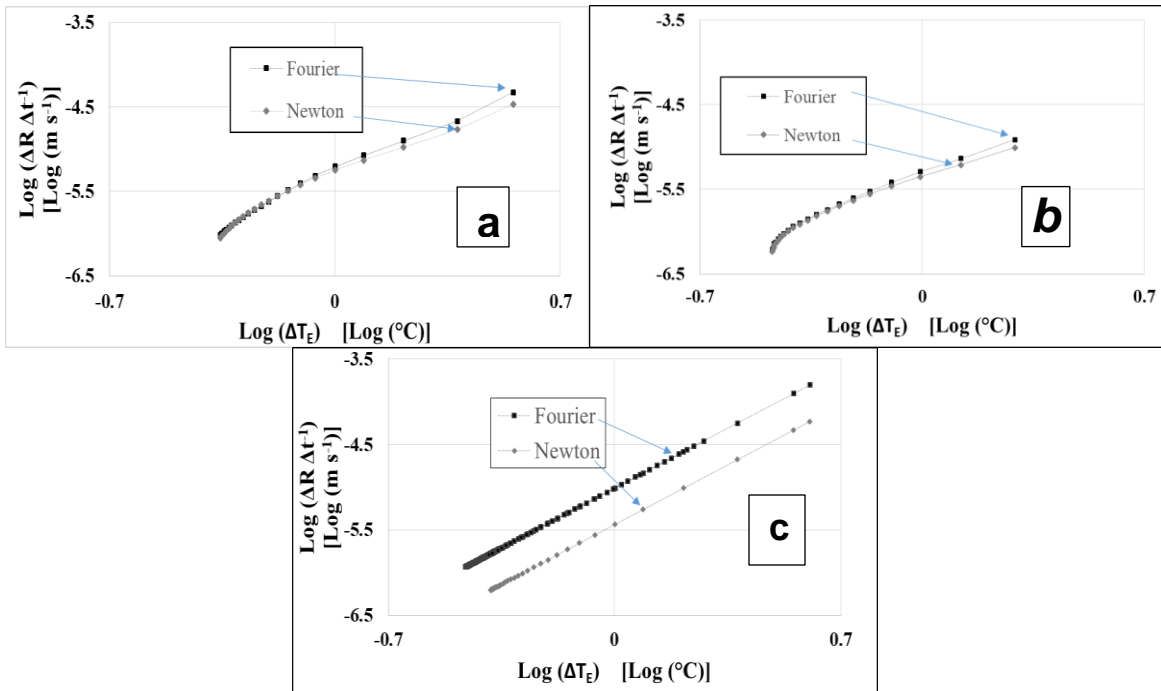


Figura A8.5. Gráficos de resultados de la aplicación de los métodos de crecimiento equiaxial eutéctico de la aleación Al Ni enfriado con 100 Litros por minuto de aire dado por los métodos de Fourier y Newton. A) Crecimiento libre, B) Dioszegi, y C) Degand.

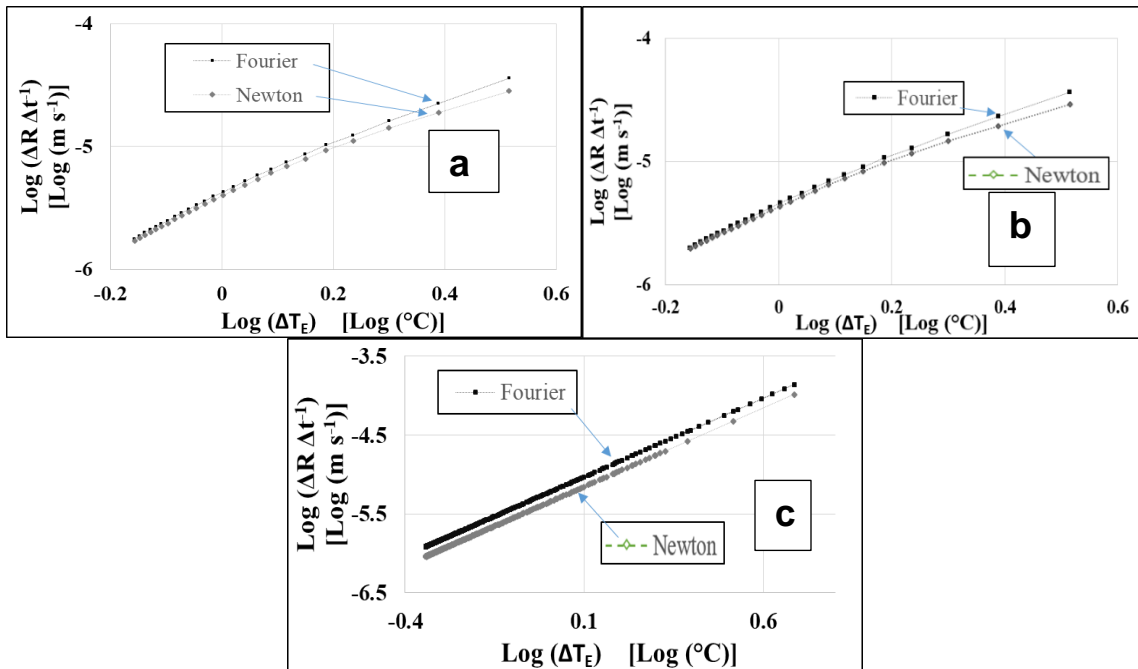


Figura A8.6. Gráficos de resultados de la aplicación de los métodos de crecimiento equiaxial eutéctico de la aleación Al Ni enfriado con 150 Litros por minuto de aire dado por los métodos de Fourier y Newton. a) FG, b) Dioszegi, y c) Degand.

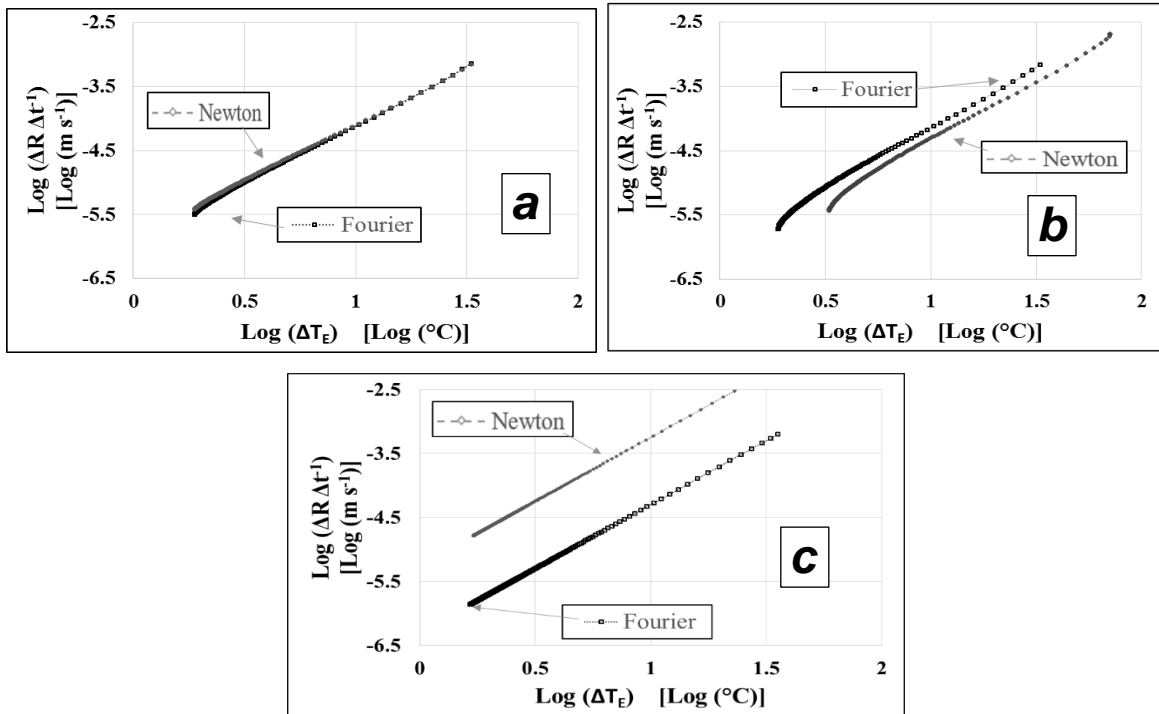


Figura A8.7. Gráficos de resultados de la aplicación de los métodos de crecimiento equiaxial eutéctico de la aleación Al Cu 33 enfriado con 75 Litros por minuto de aire dado por el método de Fourier. a) FG, b) Dioszegi y c) Degand.

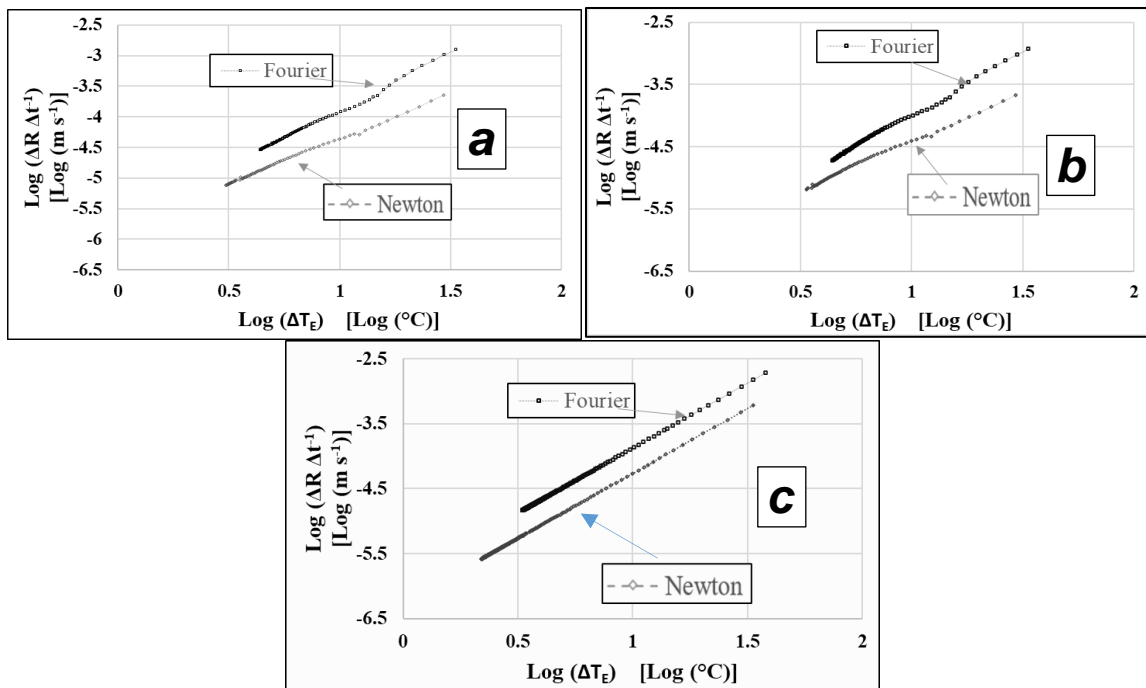


Figura A8.8. Gráficos de resultados de la aplicación de los métodos de crecimiento equiaxial eutéctico de la aleación Al Cu 33 enfriado con 100 Litros por minuto de aire dado por los métodos de Fourier y Newton. a) FG, b) Dioszegi, y c) Degand.

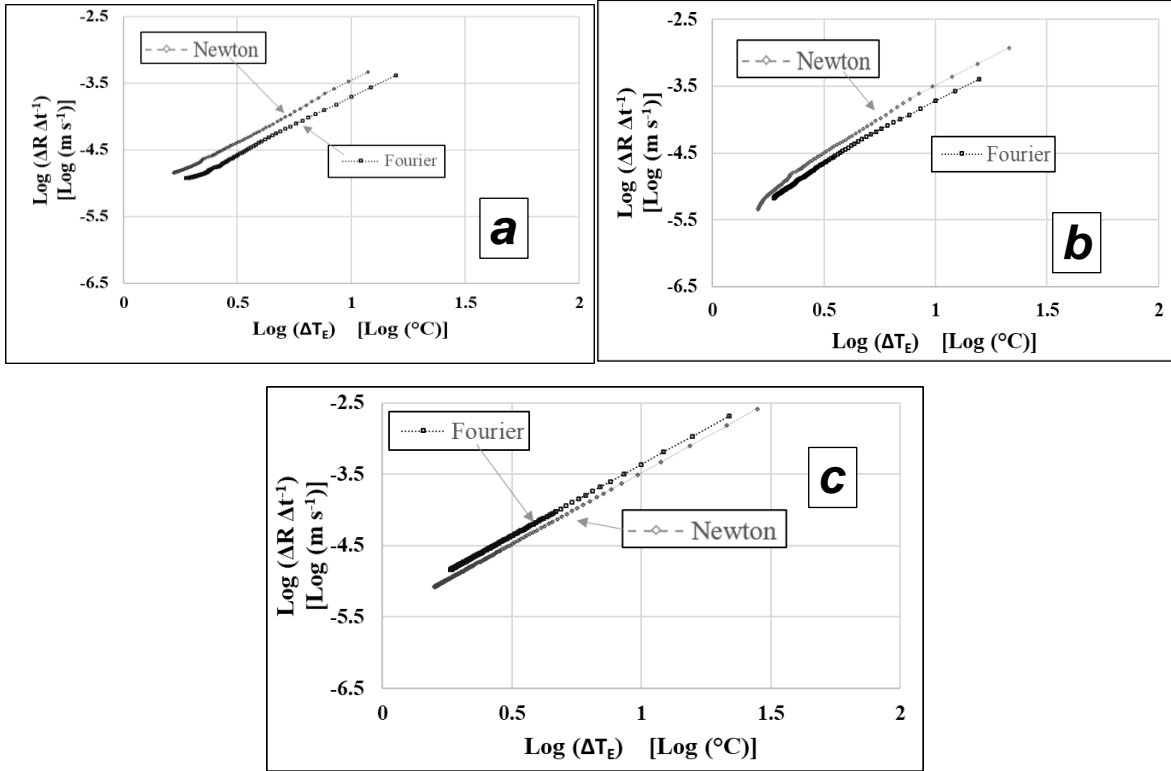


Figura A8.9. Gráficos de resultados de la aplicación de los métodos de crecimiento equiaxial eutéctico de la aleación Al Cu 33 enfriado con 150 Litros por minuto de aire dado por los métodos de Fourier y Newton. a) FG, b) Dioszegi, y c) Degand.

ANEXO IX. CÓDIGO DEL PROGRAMA MICRO-MACROSCÓPICO USADO PARA LA SIMULACIÓN DE ALEACIONES EUTÉCTICA E HIPOEUTÉCTICAS.

```

DECLARE SUB normaliza (s1, qs1(), fs1(), fs2(), sbd1(), se1#(), sumlam())
DECLARE SUB genera (hcm1(), fc1(), s1, t1(), e1(), d1(), f1(), g1(), ds(), dtm1(), r1, e1, TC1, t0, si1, TL, facto, dr1, dr4, dt1,
pt1, rt1, nt1, hi1, fs1(), ks1(), km1(), hcs1())
DECLARE SUB eutec (i, sumlam(), dt1, t2(), nn2#(), r1#(), dx1#(), x2#(), x1#(), pn1(), nn1#(), teut(), v1(), fs1())
DECLARE SUB actualiza (i, t0, dt1, t2(), fs1(), fs2(), dx1#(), xe#(), x1#(), xs2#(), dx2#(), dx1#(), XD#(), x2#(), xs1#(), ds(),
p9(), se1#(), dxd#())
DECLARE SUB datos (r1, e1, TC1, t0, si1, TL, facto, dr1, dr4, dt1, s1, tt1, rt1, s2, nt1, hi1) DECLARE SUB tipifica (s1, nt1,
fc1(), z1(), imax, j1)
DECLARE SUB inicio (nt1, fc1(), t1(), t0, TC1, h(), p8()) DECLARE SUB calculo (nt1, e1(), f1(), g1(), d1(), t2(), t1()) CLS
datos r1, e1, TC1, t0, si1, TL, facto, dr1, dr4, dt1, s1, tt1, rt1, s2, nt1, hi1

fact = 1 / dt1
INPUT "Frecuencia (Hz)de almacenamiento de datos"; muestra datwri% = fact / fmuestra
DIM tini(s1 + 1), tfin(s1 + 1), tie(s1 + 1), TLOC SOL(s1 + 1), das(s1 + 1), wie(s1 + 1)
DIM fc1(nt1 + 1), P1(s1 + 1), P2(s1 + 1), dr2(s1 + 1), la(nt1 + 1), rg1(s1 + 1), consi(s1 + 1), conmg(s1 + 1)
DIM t1(nt1 + 1), z1(s1 + 1), r1#(s1 + 1), r2#(s1 + 1), se1#(s1 + 1), dh(s1 + 1), h(s1 + 1), ccu(s1 + 1), cfe(s1 + 1) DIM d1(nt1
+ 1), f1(nt1 + 1), e1(nt1 + 1), g1(nt1 + 1), nn1#(s1 + 1), nn2#(s1 + 1), pn1(s1 + 1), dtm1(s1 + 1)
DIM qs1(s1 + 1), qc1(nt1 + 1), qa1(nt1 + 1), hcm1(s1 + 1), ds(s1 + 1), v1(nt1 + 1), FG2(s1 + 1), hcs1(nt1 + 1) DIM n1#(s1 +
1), rt1(s1 + 1), a35(s1 + 1), p8(s1 + 1), p9(s1 + 1), teut(s1 + 1), fcomp(s1 + 1)
DIM t2(nt1 + 1), fs2(s1 + 1), dx1#(s1 + 1), xs1#(s1 + 1), rs2#(s1 + 1), xs2#(s1 + 1), dx2#(s1 + 1), XD#(s1 + 1) DIM fs1(s1 +
1), xe#(s1 + 1), x1#(s1 + 1), dx1#(s1 + 1), x2#(s1 + 1), sbd1(s1 + 1)
DIM sumlam(s1 + 1), lamprom(s1 + 1), tseut(s1 + 1), fi(s1 + 1), sant(s1 + 1), dxd#(s1 + 1), ks1(nt1), km1(s1 + 1)
tipifica s1, nt1, fc1(), z1(), imax, j1
normaliza s1, qs1(), fs1(), fs2(), sbd1(), se1#(), sumlam()
inicio nt1, fc1(), t1(), t0, TC1, h(), p8()

Tee1 = 577 ros1 = 1500 cs1 = 1075.3 hi1 = 6.8
par5 = 2 * (hi1 * dt1 / dr1) * (1 / (ros1 * cs1))
grafica kx1, kx2, ky1, ky2, fg1
OPEN "eualsi.txt" FOR OUTPUT AS #1
DO
tot1 = tot1 + dt1
genera hcm1(), fc1(), s1, t1(), e1(), d1(), f1(), g1(), ds(), dtm1(), r1, e1, TC1, t0, si1, TL, facto, dr1, dr4, dt1, pt1, rt1, nt1,
hi1, fs1(), ks1(), km1(), hcs1()
calculo nt1, e1(), f1(), g1(), d1(), t2(), t1()
DESPLIEGUE qs1(), qc1(), qa1(), la(), v1(), n1#(), rt1(), dr2(), r1#(), nn1#(), fs1(), fs2(), ds(), kx1, kx2, ky1, ky2, z1(), j1, fg1,
tot1, s1, t2(), t1(), dt1, hcm1(), ros1, hcs1(), nt1, imax
FOR i = 0 TO s1
IF t2(i) < Tee1 THEN
v1(i) = (t2(i) - t1(i)) / dt1 teut(i) = Tee1
p9(i) = p9(i) + 1
eutec i, sumlam(), dt1, t2(), nn2#(), r1#(), dx1#(), x2#(), x1#(), pn1(), nn1#(), teut(), v1(), fs1() IF fs1(i) < .995 THEN
actualiza i, t0, dt1, t2(), fs1(), fs2(), dx1#(), xe#(), x1#(), xs2#(), dx2#(), dx1#(), XD#(), x2#(), xs1#(), ds(), p9(), se1#(), dxd#()
ELSE
tfin(i) = tot1 fs1(i) = 1
END IF ELSE END IF
IF fs1(i) >= .999 THEN
se1#(i) = 0 sbd1(i) = 0
ELSE END IF
LOCATE 21, 10: PRINT "nn1 nodos 0 y10"; nn1#(0), nn1#(10)
NEXT i
FOR i = 0 TO nt1 t1(i) = t2(i)
NEXT i
'cálculo de siguiente paso y fin de aplicaci#n numrec% = numrec% + 1
IF numrec% = datwri% THEN
inc = dr1
inc1 = dr4
WRITE #1, tot1, t2(0), t2(10)
numrec% = 0
ELSE END IF

LOOP UNTIL tot1 >= tt1

```

```

CLOSE END
SUB actualiza (i, t0, dt1, t2(), fs1(), fs2(), dx#(), xe#(), x1#(), xs2#(), dx2#(), dx1#(), XD#(), x2#(), xs1#(), ds(), p9(), se1#(),
dx#())
fs1(i) = 1 - EXP(-x1#(i))

IF fs1(i) < .999 THEN
ds(i) = (fs1(i) - fs2(i))
ELSE
ds(i) = 0
END IF
fs2(i) = fs1(i) END SUB
SUB calculo (nt1, e1(), f1(), g1(), d1(), t2(), t1()) FOR i = 1 TO nt1
e1(i) = e1(i) - ((d1(i) / e1(i - 1)) * f1(i - 1))
g1(i) = g1(i) - ((d1(i) / e1(i - 1)) * g1(i - 1))
NEXT i
t2(nt1) = g1(nt1) / e1(nt1)
FOR i = nt1 - 1 TO 0 STEP -1
t2(i) = (g1(i) - f1(i) * t2(i + 1)) / e1(i) NEXT i
END SUB
SUB datos (r1, e1, TC1, t0, si1, TL, facto, dr1, dr4, dt1, s1, tt1, rt1, s2, nt1, hi1)
'datos
'INPUT "Radio de la pieza (cm)"; R2 r2 = 1.5
e1 = E2 / 100
'INPUT "Temperatura de colada (° C)"; TC1
TC1 = 720
'INPUT "Temperatura inicial del molde (°C)"; T0
'INPUT "Contenido de Silicio"; si1 si1 = 7
t0 = 25
INPUT "factor de difusividad del molde"; facto
facto = 1
'INPUT " dr metal (cm) ="; dr2 dr2 = .015
dr1 = dr2 / 100
'INPUT "dt (s) ="; DT1 dt1 = 'paso de tiempo fact = 1 / dt1
'INPUT "Frecuencia (Hz)de almacenamiento de datos"; fmuestra fmuestra = 2
datwri% = fact / fmuestra
INPUT "Tiempo total de cálculo (s) "; tt1 pt1 = tt1 / dt1
r1 = r1 + e1 s1 = r1 / dr1 z24 = INT(s1)
red1 = s1 - z24
IF red1 = 0 THEN
s1 = INT(s1) ELSE
s1 = z24 + 1
END IF
s2 = e1 / dr4 z25 = INT(s2)
red2 = s2 - z25

IF red2 = 0 THEN
s2 = INT(s2) ELSE

s2 = z25 + 1
END IF END SUB
SUB eutec (i, sumlam(), dt1, t2(), nn2#(), r1#(), dx1#(), x2#(), x1#(), pn1(), nn1#(), teut(), v1(), fs1())
se1# = teut(i) - t2(i) IF pn1(i) = 0 THEN
nn1#(i) = 1 * (5.21E+08 + 3560000! * ((-1 * v1(i)) ^ 2))

pn1(i) = pn1(i) + 1
ELSE END IF DN1 = 0
dr2# = dt1 * dr1#
r1#(i) = r1#(i) + dr2#
x1#(i) = (4 / 3) * 3.1416 * ((nn1#(i) * ((r1#(i)) ^ 3)))
dx1#(i) = x1#(i) - x2#(i) END SUB
SUB genera (hcm1(), fc1(), s1, t1(), e1(), d1(), f1(), g1(), ds(), dtm1(), r1, e1, TC1, t0, si1, TL, facto, dr1, dr4, dt1, pt1, rt1,
nt1,
hi1, fs1(), ks1(), km1(), hcs1())
ros1 = 1500 hi1 = 6.8
FOR i = 0 TO s1
dtm1(i) = .0000319# * (1 - fs1(i)) + (fs1(i)) * .000055 km1(i) = 122.26 * (fs1(i)) + 77.36 * (1 - fs1(i)) hcm1(i) = (fs1(i)) * 907.31
+ 989.83 * (1 - fs1(i))
par0 = (dr1 ^ 2) / (dtm1(i) * dt1)
Fometal = 1 / par0
'construcción de matriz tridiagonal

```

```

SELECT CASE fc1(i) CASE 0:
d1(i) = 0 f1(i) = -1
e1(i) = 1 + (par0 / 4)
g1(i) = t1(i) * (par0 / 4) + (387755 / hcm1(i)) * (par0 / 4) * ds(i) CASE 1:
par1 = -1 + (1 / (2 * i))
par2 = -1 - (1 / (2 * i))
d1(i) = par1 f1(i) = par2
e1(i) = 2 + par0
g1(i) = t1(i) * (par0) + (387755 / hcm1(i)) * (par0) * ds(i) CASE 2:
ks1(i) = -4.256E-10 * t1(i) ^ 3 + 1.452E-06 * t1(i) ^ 2 - .001142 * t1(i) + 1.039 ks1(i) = ks1(i) * facto
IF t1(i) < 600 THEN
hcs1(i) = -.000915 * t1(i) ^ 2 + 1.19 * t1(i) + 740.69
ELSE
hcs1(i) = 1045.03 + .13 * t1(i) END IF
dts1 = ks1(i) / (ros1 * hcs1(i))
para1 = (dtm1(i) * ks1(i) * dr4 + dts1 * km1(i) * dr1) / (dtm1(i) * dts1)
d1(i) = -(km1(i) * dt1 / (dr1 * para1)) * (1 - 1 / i)
f1(i) = -(ks1(i) * dt1 / (dr4 * para1)) * (1 + dr4 / (i * dr1))
e1(i) = 1 + (km1(i) * dt1 / (dr1 * para1)) * (1 - 1 / i) + (ks1(i) * dt1 / (dr4 * para1)) * (1 + dr4 / (i * dr1))
g1(i) = t1(i) + 9.5E+08 * dr1 * ds(i) / para1
CASE ELSE END SELECT
NEXT i
FOR i = s1 + 1 TO nt1
ks1(i) = -4.256E-10 * t1(i) ^ 3 + 1.452E-06 * t1(i) ^ 2 - .001142 * t1(i) + 1.039 ks1(i) = ks1(i) * facto
IF t1(i) < 600 THEN
hcs1(i) = -.000915 * t1(i) ^ 2 + 1.19 * t1(i) + 740.69
ELSE
hcs1(i) = 1045.03 + .13 * t1(i) END IF
dts1 = ks1(i) / (ros1 * hcs1(i))
par4 = (dr4 ^ 2) / (dts1 * dt1) Foarena = 1 / par4

SELECT CASE fc1(i) CASE 3:
par1 = -1 + (1 / (2 * i))
par2 = -1 - (1 / (2 * i))
d1(i) = par1 f1(i) = par2
e1(i) = par4 + 2 g1(i) = t1(i) * (par4)
CASE 4:
par5 = 2 * (hi1 * dt1 / dr1) * (1 / (ros1 * hcs1(i)))
par1 = -1 + (1 / (2 * i))
d1(i) = par1 * 2 * (1 / par4)
f1(i) = 0
e1(i) = 1 - 2 * (1 / par4) * par1 + par5 g1(i) = t1(i) + par5 * t0
END SELECT NEXT i
END SUB
SUB inicio (nt1, fc1(), t1(), t0, TC1, h(), p8()) FOR i = 0 TO nt1
SELECT CASE fc1(i) CASE IS > 2
t1(i) = t0
CASE ELSE p8(i) = 0 t1(i) = TC1 h(i) = 0
END SELECT
NEXT i
END SUB
SUB normaliza (s1, qs1(), fs1(), fs2(), sbd1(), se1#(), sumlam()) FOR i = 1 TO s1
qs1(i) = 0 fs1(i) = 0
sumlam(i) = 0 sbd1(i) = 0
se1#(i) = 0
NEXT i
END SUB
SUB tipifica (s1, nt1, fc1(), z1(), imax, j1) REM TIPIFICACION
fc1(0) = 0 'simetria
FOR i = 1 TO s1 fc1(i) = 1 'metal
NEXT i
fc1(s1) = 2 'interfase
INPUT a356
FOR i = s1 + 1 TO nt1 - 1 fc1(i) = 3
NEXT
fc1(nt1) = 4 'externo
END SUB

```

ANEXO X. CÓDIGO DEL PROGRAMA DE MÉTODO INVERSO PARA LA OBTENCIÓN DE COEFICIENTE COMBINADO DE TRANSPORTE.

```

DECLARE SUB normaliza (s1, qs1(), fs1(), fs2(), sbd1(), se1#(), sumlam())
DECLARE SUB normaliza (s1, qs1(), fs1(), fs2(), sbd1(), se1#(), sumlam())
DECLARE SUB genera (hcm1(), fc1(), s1, t1(), e1(), d1(), f1(), g1(), ds(), dtm1(), r1, e1, TC1, t0, si1, TL, facto, dr1, dr4, dt1,
pt1, rt1, nt1, hi1, fs1(), ks1(), km1(), hcs1(), t2())
DECLARE SUB eutec (i, sumlam(), dt1, t2(), nn2#(), r1#(), dx1#(), x2#(), x1#(), pn1(), nn1#(), teut(), v1(), fs1())
DECLARE SUB actualiza (i, t0, dt1, t2(), fs1(), fs2(), dx1#(), xe#(), x1#(), xs2#(), dx2#(), dx1#(), XD#(), x2#(), xs1#(), ds(),
p9(), se1#(), dxd#())
DECLARE SUB datos (r1, e1, TC1, t0, si1, TL, facto, dr1, dr4, dt1, s1, tt1, rt1, s2, nt1, hi1) DECLARE SUB tipifica (s1, nt1,
fc1(), z1(), imax, j1)
DECLARE SUB inicio (nt1, fc1(), t1(), t0, TC1, h(), p8())

```

CLS

```

datos r1, e1, TC1, t0, si1, TL, facto, dr1, dr4, dt1, s1, tt1, rt1, s2, nt1, hi1 fact = 1 / dt1
INPUT "Frecuencia (Hz)de almacenamiento de datos"; fmuestra
datwri% = fact / fmuestra

```

```

DIM tini(s1 + 1), tfin(s1 + 1), tie(s1 + 1), TLOCOSOL(s1 + 1), das(s1 + 1), wie(s1 + 1)
DIM fc1(nt1 + 1), P1(s1 + 1), P2(s1 + 1), dr2(s1 + 1), la(nt1 + 1), rg1(s1 + 1), consi(s1 + 1), conmg(s1 + 1)
DIM t1(nt1 + 1), z1(s1 + 1), r1#(s1 + 1), r2#(s1 + 1), se1#(s1 + 1), dh(s1 + 1), h(s1 + 1), ccu(s1 + 1), cfe(s1 + 1) DIM d1(nt1
+ 1), f1(nt1 + 1), e1(nt1 + 1), g1(nt1 + 1), nn1#(s1 + 1), nn2#(s1 + 1), pn1(s1 + 1), dtm1(s1 + 1)
DIM qs1(s1 + 1), qc1(nt1 + 1), qa1(nt1 + 1), hcm1(s1 + 1), ds(s1 + 1), v1(nt1 + 1), FG2(s1 + 1), hcs1(nt1 + 1) DIM n1#(s1 +
1), rt1(s1 + 1), a35(s1 + 1), p8(s1 + 1), p9(s1 + 1), teut(s1 + 1), fcomp(s1 + 1)
DIM t2(nt1 + 1), fs2(s1 + 1), dx1#(s1 + 1), xs1#(s1 + 1), rs2#(s1 + 1), xs2#(s1 + 1), dx2#(s1 + 1), XD#(s1 + 1) DIM fs1(s1 +
1), xe#(s1 + 1), x1#(s1 + 1), dx1#(s1 + 1), x2#(s1 + 1), sbd1(s1 + 1), tref(1300)

```

```

DIM sumlam(s1 + 1), lamprom(s1 + 1), tseut(s1 + 1), fi(s1 + 1), sant(s1 + 1), dxd#(s1 + 1), ks1(nt1), km1(s1 + 1), T3(s1 + 1)
tipifica s1, nt1, fc1(), z1(), imax, j1
normaliza s1, qs1(), fs1(), fs2(), sbd1(), se1#(), sumlam()
inicio nt1, fc1(), t1(), t0, TC1, h(), p8() Tee1 = 577
ros1 = 1500 cs1 = 1075.3
hi1 = 60

```

```

OPEN "hini.txt" FOR OUTPUT AS #1
OPEN "en0ref.txt" FOR INPUT AS #2
INPUT #2, titulo1$, titulo2$, titulo3$
'Registro de datos experimentales
DO
j = j + 1
INPUT #2, TIM, TM1, h23 tref(j) = TM1

```

```

LOOP UNTIL EOF(2)
j = 0
DO
p23 = p23 + 1
DO

```

```

FOR i = 0 TO nt1 'registra el perfil inicial de temperaturas
T3(i) = t1(i) NEXT i

```

DO

```

genera hcm1(), fc1(), s1, t1(), e1(), d1(), f1(), g1(), ds(), dtm1(), r1, e1, TC1, t0, si1, TL, facto, dr1, dr4, dt1, pt1, rt1, nt1, hi1,
fs1(), ks1(), km1(), hcs1(), t2()

```

```

FOR i = 0 TO s1
IF t2(i) < Tee1 THEN
v1(i) = (t2(i) - t1(i)) / dt1 teut(i) = Tee1
p9(i) = p9(i) + 1
eutec i, sumlam(), dt1, t2(), nn2#(), r1#(), dx1#(), x2#(), x1#(), pn1(), nn1#(), teut(), v1(), fs1() IF fs1(i) < .995 THEN
actualiza i, t0, dt1, t2(), fs1(), fs2(), dx1#(), xe#(), x1#(), xs2#(), dx2#(), dx1#(), XD#(), x2#(), xs1#(), ds(), p9(),
se1#(), dxd#() ELSE
tfin(i) = tot1 fs1(i) = 1

```

```

END IF ELSE END IF
IF fs1(i) >= .999 THEN
se1#(i) = 0 sbd1(i) = 0
ELSE END IF
NEXT i
FOR i = 0 TO nt1 t1(i) = t2(i)
NEXT i
'cálculo de siguiente paso y fin de aplicación tot1 = tot1 + dt1
LOOP UNTIL tot1 >= tt1
'despues de cada ciclo se comparan las temperaturas exp y predicha j = p23
LOCATE 1, 1: PRINT "j, tref=", j, tref(j)

ftemp = ((tref(j) - t2(4)) / (tref(j))) * 100
DH1 = 1

SELECT CASE ftemp
CASE IS < 0
hi1 = hi1 + DH1
CASE IS > 0
hi1 = hi1 - DH1

END SELECT
ftemp = ABS(ftemp) ' si ftemp no alcanza el criterio de convergencia que es 0.01 se repite el calculo
'calculo implicito
IF ftemp < .01 THEN
teta = 1
ELSE
teta = 0
END IF

tot1 = 0

LOOP UNTIL ftemp < .01
FOR i = 0 TO nt1 t1(i) = t2(i)
NEXT i
tglob = tglob + tt1

WRITE #1, tglob, t2(4), hi1
'WRITE #3, tot1, t2(10), t2(12) LOOP UNTIL p23 > 200
CLOSE END

'finaliza el programa

SUB actualiza (i, t0, dt1, t2(), fs1(), fs2(), dx#(), xe#(), x1#(), xs2#(), dx2#(), dx1#(), XD#(), x2#(), xs1#(), ds(), p9(), se1#(),
dxd#())
fs1(i) = 1 - EXP(-x1#(i)) IF fs1(i) < .999 THEN
ds(i) = (fs1(i) - fs2(i)) ELSE
ds(i) = 0
END IF

fs2(i) = fs1(i) END SUB
SUB datos (r1, e1, TC1, t0, si1, TL, facto, dr1, dr4, dt1, s1, tt1, rt1, s2, nt1, hi1)
'INPUT "Radio de la pieza (cm)"; R2 r2 = 1.5
'INPUT "Temperatura de colada (° C)"; TC1
TC1 = 680
'INPUT "Temperatura inicial del molde (°C)"; T0 t0 = 25
'INPUT " dr metal (cm) ="; dr2
Dr2= R2/100
'INPUT "dt (s) ="; DT1
dt1 = 'paso de tiempo
fact = 1 / dt1
'INPUT "Frecuencia (Hz)de almacenamiento de datos"; fmuestra
fmuestra = 2

INPUT "paso de tiempo para calculo (s) "; tt1 pt1 = tt1 / dt1
rt1 = r1
s1 = r1 / dr1 'imax z24 = INT(s1)
red1 = s1 - z24

```

```

IF red1 = 0 THEN
s1 = INT(s1) ELSE
s1 = z24 + 1
END IF END SUB

```

```

SUB eutec (i, sumlam(), dt1, t2(), nn2#(), r1#(), dx1#(), x2#(), x1#(), pn1(), nn1#(), teut(), v1(), fs1())
se1# = teut(i) - t2(i)

```

```

IF pn1(i) = 0 THEN
nn1#(i) = '1 * (5.21E+08 + 3560000! * ((-1 * v1(i)) ^ 2))

```

```

pn1(i) = pn1(i) + 1
ELSE END IF DN1 = 0
dr2# = dt1 * dr1#
r1#(i) = r1#(i) + dr2#
x1#(i) = (4 / 3) * 3.1416 * ((nn1#(i) * ((r1#(i)) ^ 3)))
dx1#(i) = x1#(i) - x2#(i)

```

```

END SUB

```

```

SUB genera (hcm1(), fc1(), s1, t1(), e1(), d1(), f1(), g1(), ds(), dtm1(), r1, e1, TC1, t0, si1, TL, facto, dr1, dr4, dt1, pt 1, rt1,
nt1, hi1, fs1(), ks1(), km1(), hcs1(), t2())

```

```

t0 = 25
FOR i = 0 TO s1
dtm1(i) = .0000319# * (1 - fs1(i)) + (fs1(i)) * .000055 km1(i) = 122.26 * (fs1(i)) + 77.36 * (1 - fs1(i)) hcm1(i) = (fs1(i)) * 907.31
+ 989.83 * (1 - fs1(i))
par0 = (dr1 ^ 2) / (dtm1(i) * dt1) Fometal = 1 / par0
hff = 'calor sensible
'cálculo de nueva temperatura

```

```

SELECT CASE fc1(i) CASE 0:
t2(i) = t1(i) * (1 - 4 * Fometal) + 4 * Fometal * t1(i + 1) + (hff / hcm1(i)) * ds(i) CASE 1:
par1 = 1 + (1 / (2 * i))
par2 = 1 - (1 / (2 * i))
t2(i) = t1(i) * (1 - 2 * Fometal) + Fometal * par1 * t1(i + 1) + Fometal * par2 * t1(i - 1) + (hff / hcm1(i)) * ds(i) CASE 2:

```

```

ds(i)

```

```

par1 = 1 + (1 / (2 * i)) par2 = 1 - (1 / (2 * i)) Biot = hi1 * dr1 / km1(i)
t2(i) = t1(i) * (1 - 2 * Fometal * par2 - 2 * Biot * Fometal) + 2 * Fometal * par2 * t1(i - 1) + 2 * Biot * t0 + (hff / hcm1(i)) *

```

```

CASE ELSE

```

```

END SELECT NEXT i

```

```

END SUB

```

```

SUB inicio (nt1, fc1(), t1(), t0, TC1, h(), p8()) FOR i = 0 TO nt1

```

```

p8(i) = 0
t1(i) = TC1 h(i) = 0
NEXT i

```

```

END SUB

```

```

SUB normaliza (s1, qs1(), fs1(), fs2(), sbd1(), se1#(), sumlam()) FOR i = 1 TO s1

```

```

qs1(i) = 0
fs1(i) = 0 sumlam(i) = 0 sbd1(i) = 0 se1#(i) = 0
NEXT i

```

```

END SUB

```

```

SUB tipifica (s1, nt1, fc1(), z1(), imax, j1) REM TIPIFICACION

```

```

fc1(0) = 0 'simetria

```

```

FOR i = 1 TO s1 fc1(i) = 1 'metal

```

```

NEXT i

```

```

fc1(s1) = 2 'interfase

```

```

END SUB

```

ANEXO XI. CÓDIGO DE PROGRAMA DE ANÁLISIS TÉRMICO DE NEWTON Y FOURIER.

```

DECLARE SUB difusivo (alfal, alfas)
DECLARE SUB genera (t0, ti2, pend1, pend2, tinfi, tfin, tinicio, tr1) DECLARE SUB grafi (kx1, kx2, ky1, ky2, HX1)
DECLARE SUB tiempo (tinicio, tfin)
DECLARE SUB grafico (kx1, kx2, ky1, ky2, HX1) DECLARE SUB derivada (archo$, r1, r2)
'carga del archivo que contiene a las dos curvas de enfriamiento archo$ = "original.txt"
OPEN archo$ FOR INPUT AS #1
DO
w25 = w25 + 1 tt2 = tt1
INPUT #1, tt1, temp1, temp2
LOOP UNTIL EOF(1)

CLOSE
'posiciones de los dos termoparesXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXX
r1 = 0
r2 = 0.001
derivada archo$, r1, r2
gráfico kx1, kx2, ky1, ky2, HX1
OPEN "frasfinsm.txt" FOR INPUT AS #1
DO
INPUT #1, tt1, deriv, nabra
LOOP UNTIL EOF(1) CLOSE 1
OPEN "frasfinsm.txt " FOR INPUT AS #1
DO
INPUT #1, tt1, deriv, nabra
LOOP UNTIL EOF(1) CLOSE 1
PRINT "alfa liquido="; alfal
PRINT "alfa solido="; alfas
FOR i = 1 TO p1
Fs(i) = 0
NEXT
FOR i = p2 TO w25
Fs(i) = 1
NEXT
'dp es er nodo inextrno dp = p2 - p1
'primera aproximaciøn, la fracciøn sòlida crece linealmente
FOR i = p1 TO p2
Fs(i) = (i - p1) / dp
NEXT

retorna:
'generacion de curva cero
OPEN "frasfinsm.txt " FOR INPUT AS #1
OPEN "zersfinsm.txt " FOR OUTPUT AS #2
OPEN "flusfinsm.txt " FOR OUTPUT AS #3 cont = 0
integra = 0

DO
cont = cont + 1
INPUT #1, tt1, der1, nabra
SELECT CASE tt1
CASE IS < tinicio:
fs1 = 0
zero = der1
CASE IS > tfin:
fs1 = 1
zero = der1
CASE ELSE
fs1 = Fs(cont)
'roprom = (2512 * fs1 + 2535 * (1 - fs1))
roprom = 2450
'XXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXX
cprom = roprom * (907.31 * fs1 + 989.83 * (1 - fs1))
'alfal = .000019
'alfas = .0000214

```

```

alfa = alfa * (1 - fs1) + alfa * (fs1)
'XXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXX
zero = alfa * nabla
END SELECT

```

```

qs = cprom * (der1 - zero)
integra = integra + qs * dt2
WRITE #2, tt1, zero WRITE #3, tt1, qs, integra Fs(cont) = integra
LOOP UNTIL EOF(1) CLOSE
FOR i = 1 TO cont
Fs(i) = Fs(i) / i
NEXT
dfs(1) = (Fs(2) - Fs(1)) / (tiem(2) - tiem(1)) FOR i = 2 TO cont - 1
dfs(i) = (Fs(i + 1) - Fs(i - 1)) / (tiem(i + 1) - tiem(i - 1)) NEXT
dfs(cont) = (Fs(cont) - Fs(cont - 1)) / (tiem(cont) - tiem(cont - 1))
OPEN "fsosfinsm.txt " FOR OUTPUT AS #1
FOR i = 1 TO cont
WRITE #1, tiem(i), Fs(i), dfs(i) NEXT
CLOSE
OPEN "flusfinsm.txt " FOR INPUT AS #1
DO
INPUT #1, tt1, qs, integra
LOOP UNTIL EOF(1) CLOSE

```

```

IF aqui = 0 THEN GOTO retorna
END ***** SUB derivada (archo$, r1, r2)
SHARED tempi(), tiem()
OPEN archo$ FOR INPUT AS #1
DO
w = w + 1
INPUT #1, tt1, tm1, tm2

```

```

tiem(w) = tt1
LOOP UNTIL EOF(1) CLOSE
DIM deriv1(w)
deriv1(1) = (tempi(2) - tempi(1)) / (tiem(2) - tiem(1)) FOR i = 2 TO w - 1
deriv1(i) = (tempi(i + 1) - tempi(i - 1)) / (tiem(i + 1) - tiem(i - 1)) NEXT
deriv1(w) = (tempi(w) - tempi(w - 1)) / (tiem(w) - tiem(w - 1)) OPEN archo$ FOR INPUT AS #1
OPEN "frasfinsm.txt " FOR OUTPUT AS #2 w = 0 'inicializacion
DO
w = w + 1
INPUT #1, tt1, tm1, tm2
nabla = 4 * (tm2 - tm1) / ((r2 ^ 2) - (r1 ^ 2)) 'calculo nabla
WRITE #2, tt1, deriv1(w), nabla
LOOP UNTIL EOF(1) CLOSE
'dT/dt a nabla 2
END SUB

```

```

SUB difusivo (alfa, alfa)
OPEN "frasfinsm.txt " FOR INPUT AS #1
OPEN "alfsfinsm.txt " FOR OUTPUT AS #2
DO
INPUT #1, tt1, deriv, nabla
IF nabla = 0 THEN nabla = 1 alfa = deriv / nabla
WRITE #2, tt1, alfa

```

```

LOOP UNTIL EOF(1) CLOSE
OPEN "alfsfinsm.txt " FOR INPUT AS #1 sum1 = 0: cont1 = 0
sum2 = 0: cont2 = 0
DO
INPUT #1, tt1, alfa
IF tt1 >= tliq1 AND tt1 <= tliq2 THEN
sum1 = sum1 + alfa cont1 = cont1 + 1
END IF
IF tt1 >= tsol1 AND tt1 <= tsol2 THEN
sum2 = sum2 + alfa cont2 = cont2 + 1
END IF

```



```

LOOP UNTIL EOF(1) CLOSE

alfal = sum1 / cont1
alfas = sum2 / cont2
END SUB

SUB genera (t0, ti2, pend1, pend2, tinfi, tfin, tinicio, tr1) OPEN "DERIV.DAT" FOR INPUT AS #1
DO
INPUT #1, tt1, der1
IF tt1 = tinicio THEN VOLTRON = der1
IF tt1 = tfin THEN VOLON = der1
LOOP UNTIL EOF(1)

CLOSE
OPEN "DERIV.DAT" FOR INPUT AS #1
OPEN "DERZER.DAT" FOR OUTPUT AS #2

DO
INPUT #1, tt1, der1
SELECT CASE tt1
CASE IS < tinicio zer1 = der1
CASE IS > tfin zer1 = der1
CASE ELSE
zer1 = -aa# * EXP(be# * tt1) END SELECT
WRITE #2, tt1, der1, zer1
LOOP UNTIL EOF(1) CLOSE 1, 2
END SUB
SUB tiempo (tinicio, tfin)
OPEN "segder.dat" FOR INPUT AS #1
DO
INPUT #1, tt1, sec1 i1 = i1 + 1
IF i1 > 2 THEN
fun = sec1 * sec2 tprom = (tt1 + tt2) / 2
ELSE END IF
sec2 = sec1
IF fun < 0 THEN
w10 = w10 + 1
IF w10 = 1 THEN tinicio = tprom
IF w10 = 4 THEN tfin = tprom
ELSE END IF tt2 = tt1
LOOP UNTIL EOF(1) CLOSE
END SUB

```

ANEXO XII. CÓDIGO DEL PROGRAMA QUE APLICA EL METODO LGK.

```
DECLARE SUB ecmulti (H, cp, m, c0, k0, lamda, sigma, nu, dtemp, x, IVx, IVy, fpr)
DECLARE SUB radio (H, cp, m, c0, k0, lamda, sigma, nu, x, IVx, rpun)
DECLARE SUB ecuacion (H, cp, m, c0, k0, lamda, sigma, nu, dtemp, x, IVx, IVy, fpr)
DECLARE SUB ivantsov (x, IVx, nu, IVy)
DECLARE SUB DATOS (H, cp, m, c0, k0, lamda, sigma, nu, dtemp, dif)
```

```
' Este programa calcula,para un intervalo de subenfriamientos
'preestablecido,la velocidad de avance de la punta dendrítica y
'el radio de punta dendrítica asociado,como una función del
'subenfriamiento del líquido remanente.
'Los datos generados se guardan dentro de un archivo que ser
'posteriormente procesado mediante regresión para obtener a una
'ecuación que correlaciona a la velocidad de avance con el
'subenfriamiento instantáneo.
'El procedimiento consiste básicamente en lo siguiente:
'se parte de un intervalo de Pc en el cual se encuentra el Pc
'que satisface al sistema de ecuaciones para el subenfriamiento
'de interés.
'Aplicando métodos numéricos se calcula a la raíz actual y al
'error aproximado y con estos datos se actualiza a la raíz, y
'al intervalo de solución hasta que se cumpla con el criterio
'de convergencia
'Debido a la inestabilidad que presentan otros métodos, el
'procedimiento más simple consiste en realizar el cálculo en
'dos etapas:
'(1)primero se aplica al método de bisección hasta determinar
'un intervalo de solución lo suficientemente pequeño, que
'permita la aplicación de un método más eficiente
'(2) Partiendo del intervalo resultante del paso anterior, se
'aplica el método de la regla falsa, hasta que se cumpla con
'el criterio de convergencia.
```

CLS

archivo\$ = "PBA15Cu.txt"

```
'se abre el archivo en el que serán almacenados los resultados
OPEN archivo$ FOR OUTPUT AS #1
'datos iniciales para el cálculo
DATOS H, cp, m, c0, k0, lamda, sigma, nu, dtemp, dif
'Se definen los ciclos de cálculo para generar la información
'deseada, en este caso el intervalo de subenfriamientos
'considerado es de 0.1 oC a 15 oC, con un paso de cálculo de
'0.1 oC.
```

```
FOR j = 1 TO 150
  dtemp = dtemp + .1
```

```
'límites inferior, pl, y superior, pu,utilizados como
'intervalo inicial generalizado de Pc para todos los subenfriamientos
'considerados
```

```
pl = 1E-08
pu = 1
```

```
epr = .0000001# 'error aproximado aceptable,en valor absoluto
'en la primera etapa y en valor porcentual en la segunda etapa de
'cálculo
```

```
'inicio del procedimiento
'aplicación de la primera etapa de cálculo, método de bisección
DO
```

```
'cálculo de la función para pl
x = pl
ivantsov x, IVx, nu, IVy
```

```

ecmulti H, cp, m, c0, k0, lamda, sigma, nu, dtemp, x, IVx, IVy, fpr
gl1 = fpr
'calculo de pr
pr = (pu + pl) / 2
'calculo de la funcion para pr
x = pr
'error aprox
cont = cont + 1
IF cont > 1 THEN
  Eap = pu - pl
ELSE
  Eap = 10
END IF
ivantsov x, IVx, nu, IVy
ecmulti H, cp, m, c0, k0, lamda, sigma, nu, dtemp, x, IVx, IVy, fpr
gr1 = fpr
LOCATE 1, 1: PRINT "trabajando"; cont
'redefinicion de limites
fpru = gl1 * gr1
SELECT CASE fpru
  CASE IS < 0
    pu = pr
  CASE ELSE
    pl = pr
END SELECT
pr1 = pr
LOOP UNTIL Eap < epr

```

'inicio de la segunda etapa de calculo, aplicaciøn
'de la segunda etapa, m,todo de regla falsa'

```

PRINT "Xu .:"; pu
PRINT "XI .:"; pl
'INPUT red7
DO
'calculo de la funcion para pl
x = pl
ivantsov x, IVx, nu, IVy
ecmulti H, cp, m, c0, k0, lamda, sigma, nu, dtemp, x, IVx, IVy, fpr
gl1 = fpr
'calculo de la funcion para psup
x = pu
ivantsov x, IVx, nu, IVy
ecmulti H, cp, m, c0, k0, lamda, sigma, nu, dtemp, x, IVx, IVy, fpr
gu1 = fpr
'calculo de pr
pr = pu - (gu1 * (pl - pu)) / (gl1 - gu1)
'calculo de la funcion para pr
x = pr
'error aprox
cont = cont + 1
IF cont > 1 THEN
  Eap = ABS((pr - pr1) / pr1) * 100
ELSE
  Eap = 10
END IF
ivantsov x, IVx, nu, IVy
ecmulti H, cp, m, c0, k0, lamda, sigma, nu, dtemp, x, IVx, IVy, fpr
gr1 = fpr
LOCATE 1, 1: PRINT "trabajando"; cont

'redefinicion de limites
fpru = gl1 * gr1
SELECT CASE fpru
  CASE IS < 0
    pu = pr
  CASE ELSE
    pl = pr
END SELECT
pr1 = pr

```

' con el último valor de Pc raíz se calcula el subenfriamiento
'dtemp que será eventualmente almacenado en el archivo de
'resultados, una vez que se alcance la convergencia.

```

LOOP UNTIL Eap < epr

PRINT pr
x = pr
radio H, cp, m, c0, k0, lamda, sigma, nu, x, IVx, rpun
vpun = 2 * dif * x / rpun
PRINT "radio :"; rpun
PRINT "velocidad : "; vpun
PRINT "subenf "; dtemp
WRITE #1, vpun, rpun, dtemp

NEXT j
CLOSE

SUB DATOS (H, cp, m, c0, k0, lamda, sigma, nu, dtemp, dif)
cp = 959.18
H = 387755
alfa = .0000435
dif = 3E-09
m = -6.587
k0 = .117
'INPUT " C inicial % "; c0
c0 = 7
lamda = 9E-08
nu = alfa / dif
sigma = .025
'INPUT " subenfriamiento "; dtemp
END SUB

SUB ecmulti (H, cp, m, c0, k0, lamda, sigma, nu, dtemp, x, IVx, IVy, fpr)
ksi = .117
kmg = .438
kcu = .172
kfe = .029
msi = -6.587
mmg = -6
mcu = -3.394
mfe = -2.94
csi = 0.08
cfe = .1261
cmg = .0077
ccu = 5.04
parsi1 = (1 - (1 - ksi) * IVx)
parsi2 = x * msi * csi * (1 - ksi)
parmg1 = (1 - (1 - kmg) * IVx)
parmg2 = x * mmg * cmg * (1 - kmg)
parcu1 = (1 - (1 - kcu) * IVx)
parcu2 = x * mcu * ccu * (1 - kcu)
parfe1 = (1 - (1 - kfe) * IVx)
parfe2 = x * mfe * cfe * (1 - kfe)

teta = H / cp
'fpr = -dtemp + teta * IVy + m * c0 * (1 - (1 / par1)) + 2 * sigma * (teta * (x / nu) - (par2 / par1))
sumtc = msi * csi * (1 - (1 / parsi1)) + mmg * cmg * (1 - (1 / parmg1)) + mfe * cfe * (1 - (1 / parfe1)) + mcu * ccu * (1 - (1 /
parcu1))
paradio = (parsi2 / parsi1) + (parmg2 / parmg1) + (parfe2 / parfe1) + (parcu2 / parcu1)
fpr = -dtemp + teta * IVy + sumtc + 2 * sigma * (teta * (x / nu) - paradio)

END SUB

SUB ecuacion (H, cp, m, c0, k0, lamda, sigma, nu, dtemp, x, IVx, IVy, fpr)
par1 = (1 - (1 - k0) * IVx)
par2 = x * m * c0 * (1 - k0)
teta = H / cp
fpr = -dtemp + teta * IVy + m * c0 * (1 - (1 / par1)) + 2 * sigma * (teta * (x / nu) - (par2 / par1))

```

END SUB

SUB ivantsov (x, IVx, nu, IVy)
' x es en su caso pl,pu o pr

```
SELECT CASE x
CASE IS <= .259
  F1 = 1
  S1 = 0
  FOR I = 1 TO 10
    F1 = F1 * I
    S1 = S1 + ((-1) ^ I) * (x ^ I) / (I * F1)
  NEXT I
  E1 = -.5772157 - LOG(x) - S1
  IVx = x * EXP(x) * E1
```

```
  CASE ELSE
    IVx = 2 * x / (2 * x + 1)
```

END SELECT

y = x / nu

```
SELECT CASE y
CASE IS <= .259
  F1 = 1
  S1 = 0
  FOR I = 1 TO 10
    F1 = F1 * I
    S1 = S1 + ((-1) ^ I) * (y ^ I) / (I * F1)
  NEXT I
  E1 = -.5772157 - LOG(y) - S1
  IVy = y * EXP(y) * E1
```

```
  CASE ELSE
    IVy = 2 * y / (2 * y + 1)
```

END SELECT

END SUB

SUB radio (H, cp, m, c0, k0, lamda, sigma, nu, x, IVx, rpun)

```
par1 = (1 - (1 - k0) * IVx)
par2 = x * m * c0 * (1 - k0)
teta = H / cp
rpun = (lamda / sigma) / ((teta * x / nu) - (par2 / par1))
```

END SUB

ANEXO XIII. PORTADA DE ARTICULO Y DOCUMENTO DE APROVACIÓN.

RESEARCH

REVISTA MEXICANA DE FÍSICA 60 (2014) 176–183

MAY-JUNE 2014

Determinación de la cinética de crecimiento de grano durante la solidificación de una aleación eutéctica Al-Cu

M. Morua-Ramírez, M. Ramírez-Argaez and C. González-Rivera
Departamento de Ingeniería Metalúrgica, Facultad de Química, UNAM,
Edificio "D" Circuito de los Institutos s/n, Cd. Universitaria, México, 04510, D. F., México.
e-mail: carlosgr@unam.mx

A. Juárez-Hernández
Facultad de Ingeniería Mecánica y Eléctrica, Universidad Autónoma de Nuevo León,
FIME, Pedro de Alba s/n, Ciudad Universitaria, San Nicolás de los Garza, Nuevo León, 66450, México.

M. Herrera-Trejo
Centro de Investigación y de Estudios Avanzados del Instituto Politécnico Nacional-Unidad Saltillo,
Apartado Postal 663, Saltillo, 25000 Coah., México.

Received 11 October 2013; accepted 27 February 2014

En este trabajo se aplica una metodología para describir cuantitativamente el crecimiento del grano durante la solidificación de una aleación de Al-Cu con composición cercana a la eutéctica, utilizando curvas de enfriamiento, densidad de granos por unidad de volumen y datos de evolución de la fracción sólida. La metodología supone el libre crecimiento del grano y una dependencia exponencial de la velocidad de crecimiento de los granos con respecto al subenfriamiento. La información recopilada se procesa numéricamente con el fin de encontrar los valores numéricos de los parámetros pre-exponencial y exponencial que caracterizan la cinética de crecimiento de grano en función del subenfriamiento. La evolución de la fracción sólida en la muestra durante la solidificación se determina aplicando el análisis térmico de Fourier (FTA) así como el método de análisis térmico de Newton (NTA), con el fin de comparar sus mediciones. La densidad de granos por unidad de volumen se obtiene utilizando métodos metalográficos. Todos los parámetros obtenidos fueron alimentados en un modelo mecanístico elaborado como parte de este trabajo para validar la metodología. Se encontró una buena concordancia entre los datos experimentales y las curvas de enfriamiento simuladas, sugiriendo que esta metodología podría ser utilizada para generar información útil necesaria para simular la solidificación eutéctica. El método de NTA es menos eficaz que el método de FTA para obtener los parámetros de crecimiento, pero su simplicidad justifica su uso como una primera aproximación.

Descriptores: Cinética de solidificación; crecimiento de grano; análisis térmico de Newton y de Fourier; modelado determinístico.

In this work a methodology is applied to describe quantitatively grain growth during solidification of a near eutectic Al-Cu alloy using cooling curves, volume grain density and solid fraction evolution data. The methodology assumes free grain growth before impingement and an exponential dependence of the grain growth rate on undercooling. Information collected is processed numerically in order to find numerical values for the pre-exponential and exponential parameters that characterize the grain growth kinetics as a function of undercooling. The evolution of solid fraction in the sample during solidification is determined by applying the Fourier (FTA) and the Newton (NTA) thermal analysis methods in order to compare their performances. The volume grain density is obtained using metallographic methods. All the obtained parameters were feed into a mechanistic model, elaborated as a part of this work, to validate the methodology. It was found a relatively good agreement between the experimental and the predicted cooling curves, which suggest that this methodology could be used to generate useful information needed to simulate eutectic solidification. NTA method is less effective than FTA method to obtain the growth parameters but its simplicity justifies its use as a first approach.

Keywords: Solidification kinetics; grain growth; Newton and Fourier thermal analysis; deterministic modelling.

PACS: 64.70.D-; 81.30.Fb

1. Introducción

La predicción de formación y evolución de la microestructura en una aleación metálica durante la solidificación está íntimamente ligada a la comprensión de la cinética de solidificación. Para tal efecto, en el último par de décadas han sido propuestos diferentes modelos. Un trabajo reciente de Nakajima *et al.* [1] resume el progreso metodológico de la simulación de la solidificación.

Los modelos de solidificación utilizados en simulaciones implican cálculos sobre la nucleación y cinética de crecimiento que a su vez dependen de la disponibilidad de leyes

de nucleación y de crecimiento capaces de reproducir el comportamiento experimental de las aleaciones de interés. Por esta razón, es necesario desarrollar nuevos métodos, de fácil aplicación en el laboratorio de fundición, para obtener datos experimentales que permitan simular la cinética de solidificación de aleaciones.

El análisis térmico de Newton (NTA) [24] y el análisis térmico de Fourier (FTA) [5-10] son los procedimientos que más se han utilizado para estudiar la cinética de solidificación de varios sistemas de aleaciones de interés metalúrgico como aleaciones comerciales [5,6] y compósitos de matriz metálica [7,8] a partir del procesamiento numérico de cur-

La información encontrada en la Base de Datos es:

Número de referencia del trámite: **29236**
Tipo de formato: **Registro de Art. o Patente para alumnos de Doctorado**
Plan de estudios: **05-5107**
Nombre del solicitante: **Morua Ramírez Miguel Angel**
Fecha de registro: **27/04/2015**
Estado actual: **Dictaminado por el CA**

HISTORIAL:

--> El SACC recomienda: **Aprobar el trámite**
--> Fecha de revisión del SACC: **08.05.2015**
-----> El CA recomienda: **Aprobar el trámite**
-----> Fecha de revisión del CA: **12.05.2015**
