



UNIVERSIDAD NACIONAL AUTÓNOMA DE MÉXICO
FACULTAD DE QUÍMICA
MODELADO DEL ENFRIAMIENTO Y SOLIDIFICACION DE
UNA ALEACION EUTECTICA CON BASE EN
INFORMACION EXPERIMENTAL

QUE PARA OBTENER EL TÍTULO DE

INGENIERA QUÍMICA METALÚRGICA

PRESENTA

GLORIA ALICIA JARA CHAVEZ



MÉXICO, D.F.

2014



Universidad Nacional
Autónoma de México



UNAM – Dirección General de Bibliotecas
Tesis Digitales
Restricciones de uso

DERECHOS RESERVADOS ©
PROHIBIDA SU REPRODUCCIÓN TOTAL O PARCIAL

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

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

JURADO ASIGNADO:

PRESIDENTE:

Profesor: ATLATENCO TLAPANCO EUSEBIO CANDIDO

VOCAL:

Profesor: GONZALEZ RIVERA CARLOS

SECRETARIO:

Profesor: SANCHEZ SANTIAGO ARTURO ALEJANDRO

1er. SUPLENTE:

Profesor: AMARO VILLEDA ADRIAN MANUEL

2° SUPLENTE:

Profesor: RUIZ TAMAYO AGUSTIN GERARDO

SITIO DONDE SE DESARROLLÓ EL TEMA:

DEPARTAMENTO DE INGENIERÍA QUÍMICA METALURGIA, FACULTAD DE QUÍMICA

ASESOR DEL TEMA:

DR. CARLOS GONZÁLEZ RIVERA

SUPERVISOR TÉCNICO:

M. EN I. AGUSTÍN GERARDO RUIZ TAMAYO

SUSTENTANTE:

JARA CHAVEZ GLORIA ALICIA

Agradecimientos:

Al programa de apoyo para la investigación e innovación tecnológica (PAPPIT) con clave IN113912.

A la fundación Alberto y Dolores Andrade por su apoyo a lo largo de toda mi vida académica

Al Doctor Carlos González Rivera por brindarme los conocimientos necesarios para poder llevar a cabo este proyecto, así como el haberme apoyado en cada momento durante su realización y haber brindado su paciencia, sus conocimientos y su tiempo.

Dedicatorias.

A mi mejor amigo Héctor Humberto Micheo Sánchez , porque desde el día que nos conocimos he compartido contigo los mejores y peores momentos de mi vida, tú has creído en mi a pesar de todo, te agradezco por nunca haberme abandonado, por todas la veces que me has protegido de mi misma, por tu paciencia infinita para conmigo, por nuestra amistad, que para mí es el tesoro mas valioso que tengo, eres más que mi mejor amigo, eres mi familia, sin ti yo no estaría aquí, querido Héctor este logro también es tuyo, te quiero.

A mi madre Gloria Chávez Moya, porque gracias a ti soy la persona que soy ahora, tú me has conducido hasta aquí, me formaste desde que era pequeña, y aun que a veces tuviste que ser dura conmigo nunca flaqueaste, tú me has ayudado y apoyado incondicionalmente, todos tenemos muchos defectos, pero te quiero decir que eres la mejor madre que me puede haber tocado en esta vida.

A mi Padre Rodolfo Jara Vargas, por haber pagado mi educación y nunca haberse quejado, te agradezco todos los sacrificios que has hecho por mí, en un principio no me daba cuenta de que pasara lo que pasara podía contar contigo, pero ahora lo sé, y te agradezco todos y cada uno de las privaciones y sacrificios que has aceptado para que yo llegara hasta aquí y para que seamos la familia que somos ahora. Te quiero.

A mi hermana Diana Patricia Jara Chávez porque juntas hemos crecido, tú eres parte de mí y yo de ti.

A mi amiga Liz Alejandrina Bugarini Diaz-Gonzalez por su infinita paciencia y su apoyo

A mis hermanas Belén Alhelí Sánchez Bolaños y Patricia Cruz Colindrez, nenas hemos pasado tantas cosas juntas, me siento tan feliz de que estén aquí para ver esto, estoy segura que aun nos queda mucho por vivir juntas, gracias por ser mi familia.

A Ergir Sánchez Antonio y Javier Augusto Gómez Reguera, por haberme apoyado durante este camino, por todas las veces que me han ayudado y lo siguen haciendo, por ser unos amigos de verdad, como nunca había tenido, agradezco su inteligencia que han compartido cada día conmigo y doy gracias por haberlos conocido

A mis amigas Yoloxochitl María Elena Morales Martínez y Delia Zapata Valdez por ser mis mejores amigas en la carrera, chicas son excepcionales.

En memoria de mi tío Pedro Antonio Jara Vargas, tío este logro es para ti, ojala estuvieras aquí para verme, estoy segura que estaría orgulloso de mi.

ÍNDICE

	Página
Resumen.....	7
CAPÍTULO 1.0 ANTECEDENTES	9
1.1 IMPORTANCIA DEL MODELADO.....	9
1.2 MICROMACRO MODELADO DE LA SOLIDIFICACIÓN.....	10
1.3 ANÁLISIS TÉRMICO.....	11
1.3.1 ANÁLISIS TÉRMICO DIFERENCIAL (DTA).....	11
1.3.2 CALORIMETRÍA DIFERENCIAL DE BARRIDO.....	12
1.4 ANÁLISIS DE CURVAS DE ENFRIAMIENTO ASISTIDO POR COMPUTADORA	13
1.4.1 MÉTODO DE NEWTON (NTA, NEWTON THERMAL ANALYSIS).....	14
1.4.2 ANÁLISIS TÉRMICO DE FOURIER FTA (FOURIER TERMAL ANALYSIS).....	17
1.5 MODELADO INVERSO DE LA TRANSFERENCIA DE CALOR: OBTENCIÓN DEL COEFICIENTE GLOBAL DE TRANSFERENCIA DE CALOR EN FUNCIÓN DE LA TEMPERATURA.....	18
1.6 OBTENCIÓN DE PARÁMETROS DE CRECIMIENTO DE GRANO.....	19
1.6.1 MÉTODO DE DEGAND.....	20
1.6.2 MÉTODO DE CRECIMIENTO LIBRE	21
1.7 EL SISTEMA ALUMINIO SILICIO.....	23
1.7.1 MODIFICACIÓN DE ALEACIONES Al-Si.....	24
1.7.2 TIPOS DE MODIFICACIÓN.....	25
1.8 OBJETIVOS	27

1.8.1 GENERAL.....	27
1.8.2 PARTICULARES.....	27
CAPÍTULO 2.0 MODELO MATEMÁTICO.....	29
2.1 PLANTEAMIENTO DEL MODELO.....	29
CAPÍTULO 3.0 EXPERIMENTACIÓN.....	35
3.1 ARREGLO EXPERIMENTAL	35
CAPÍTULO 4. RESULTADOS Y DISCUSION.....	38
4.1 IMPLEMENTACIÓN DEL MÉTODO DE NEWTON Y RESULTADOS OBTENIDOS.....	38
4.2 OBTENCIÓN DEL COEFICIENTE GLOBAL DE TRANSFERENCIA DE CALOR A PARTIR DE DATOS EXPERIMENTALES.....	46
4.3 DETERMINACIÓN DE PARÁMETROS DE CRECIMIENTO DE GRANO....	50
4.3.1 METODO DE DEGAND.....	50
4.3.2 MÉTODO DE CRECIMIENTO LIBRE.....	52
4.4 ANÁLISIS METALOGRAFICO.....	54
4.5 VALIDACIÓN.....	58
4.5.1 DATOS ALIMENTADOS AL PROGRAMA PARA REALIZAR LA SIMULACIÓN DE CURVAS DE ENFRIAMIENTO.....	58
5.0 CONCLUSIONES.....	62
REFERENCIAS.....	63
ANEXOS.....	64

RESUMEN

En este trabajo se propone una metodología para la obtención de los parámetros de crecimiento de grano y el coeficiente global de transferencia de calor presentes durante el enfriamiento y la solidificación de una aleación aluminio silicio modificada con estroncio, enfriada en un molde metálico.

El método de determinación de los coeficientes cinéticos de crecimiento de grano supone un crecimiento de grano libre antes del empalmamiento.

El tratamiento de datos consta del procesamiento numérico de curvas de enfriamiento obtenidas experimentalmente mediante la aplicación del método de Newton, para calcular la evolución de la fracción sólida en función del tiempo y el calor latente de solidificación. Los conceptos básicos del modelado inverso de la transferencia de calor son empleados para la obtención del coeficiente global de transferencia de calor como una función de la temperatura.

Se realizó el análisis metalográfico de la macroestructura de las muestras experimentales para determinar la densidad de granos por unidad de volumen.

La información recopilada, relativa a la evolución de la fracción sólida y la densidad de granos, se procesa numéricamente para obtener los coeficientes preexponencial y exponencial de crecimiento de grano empleando dos métodos diferentes, utilizando primero el método de Degand y luego el método de crecimiento libre, con la finalidad de comparar los resultados obtenidos con cada uno de los procedimientos, y realizar las simulaciones pertinentes.

Para validar la metodología se utiliza un modelo mecanístico que simula el enfriamiento y la solidificación en un molde metálico para una aleación aluminio-silicio modificada con estroncio, en un molde cilíndrico aislado térmicamente en las tapas, se supone enfriamiento newtoniano en todo el sistema.

La validación se realiza comparando los resultados obtenidos experimentalmente con los predichos por el modelo mecanístico empleando los valores de calor latente, densidad de granos, coeficientes de crecimiento de grano y coeficiente global de transferencia de calor, obtenidos de la aplicación de la metodología propuesta. El modelo mecanístico se implementó en un programa de cómputo para realizar la simulación de las curvas de enfriamiento bajo estudio.

CAPÍTULO 1.0 ANTECEDENTES

En este capítulo se plantean las bases teóricas que se emplearon para la determinación de los parámetros de crecimiento de grano μ y n por dos métodos: Degand y crecimiento libre, así como los aspectos más relevantes del método de Newton y una descripción detallada del procesamiento numérico asociado con el modelado inverso de la transferencia de calor, para la obtención del coeficiente global del coeficiente de transferencia de calor del sistema en función de la temperatura ($h(T)$).

1.1 IMPORTANCIA DEL MODELADO

Hoy en día existen varios métodos de fabricación de aleaciones que requieren un control en la solidificación de las piezas. En la mayoría de estos procesos, el desempeño de los productos finales dependerá de la microestructura formada durante éste cambio de fase.

Es bien sabido que la calidad y las propiedades de los productos solidificados dependen del control de las microestructuras formadas durante la solidificación y a la vez en el control de proceso adoptado para obtener las propiedades esperadas, control que resulta de la comprensión de las causas detrás del efecto de los parámetros de procesamiento sobre la formación de microestructura.

La predicción de la evolución térmica y microestructural durante la solidificación es un elemento esencial para optimizar el control de propiedades mecánicas de los productos finales y en este sentido varios tipos de modelos se han desarrollado en el último par de décadas.

Estos modelos incluyen cálculos sobre la nucleación y la cinética de crecimiento de grano que a su vez dependen de la disponibilidad de micro modelos de nucleación y de crecimiento capaces de reproducir el comportamiento experimental de la aleación en estudio. Esta información está disponible en bases de datos comerciales para las aleaciones convencionales, pero teniendo en cuenta la gran diversidad de aleaciones utilizadas en la industria, puede ser muy escasa en varios casos.

Tomando en cuenta lo anterior el desarrollo de métodos experimentales fiables, para obtener información térmica y cinética necesaria para el modelado de la solidificación a partir de una prueba simple in situ, es de gran interés.

Los avances hechos en las últimas décadas nos permiten generar modelos a través de los que el crecimiento de grano esté vinculado con la evolución de la

fracción sólida. El desarrollo de estas técnicas tiene su origen en el análisis térmico, el cual consiste en la medición de la temperatura del metal que es vaciado en un molde utilizando un termopar ubicado en el centro de dicho molde. Estas mediciones se relacionan con la microestructura final obtenida.

Durante la solidificación de una aleación ocurren dos procesos de nucleación, el primero de ellos corresponde a la nucleación de la fase primaria, que servirá como sustrato para el segundo proceso: la nucleación del componente eutéctico.

Mediante el método de análisis de curvas de enfriamiento asistido por computadora se obtendrán curvas de enfriamiento experimentales, las que serán procesadas con el método de análisis térmico de Newton, para obtener la curva cero de Newton, la cual nos permitirá obtener el calor latente de solidificación, así como, la evolución sólida con respecto al tiempo.

1.2 MICROMACRO MODELADO DE LA SOLIDIFICACIÓN

Durante la fabricación de aleaciones se sabe que para obtener un buen desempeño de los productos finales, es necesario analizar su proceso de solidificación, así como la formación de su microestructura, mediante la obtención de las propiedades mecánicas deseadas.

La predicción de la evolución térmica y microestructural durante la solidificación es un elemento esencial para optimizar el control de las propiedades mecánicas.

Para este fin, en las últimas décadas se han desarrollado técnicas, que nos permiten conocer los parámetros térmicos y cinéticos que ocurren durante la solidificación de una aleación mediante el estudio de sus curvas de enfriamiento, mejor conocido por sus siglas en inglés como CACCA (*computer aided cooling curve analysis*), esta técnica involucra el monitoreo de los cambios de temperatura en un metal fundido durante su enfriamiento y solidificación, además permite obtener información sobre la cinética de solidificación y el calor latente asociado a ésta.

En los últimos años se han desarrollado avances en el estudio de la solidificación de aleaciones desde diferentes perspectivas:

-Macroscópica: Abarca las observaciones que se pueden realizar en el orden de milímetros a metros, las cuales incluyen defectos que se pueden apreciar a simple vista como macrorechupes, macrosegregación, fisuras, etc. En esta escala, los fenómenos se describen mediante las ecuaciones de transferencia de calor.

-Mesoscópica (microestructural): Va del orden de centímetros a micrómetros. A esta escala se aprecian las dendritas y las estructuras de colada.

-Microscópica: Del orden de micrómetros a nanómetros. En esta escala se analizan elementos tales como el tipo y tamaño de grano, la morfología de los precipitados y la cantidad relativa de microconstituyentes presentes. Además a esta escala ocurre la formación de microestructura y la formación de defectos.

-Atómica: Del orden de nanómetros, a esta escala se analiza la estructura cristalina y los defectos lineales, puntuales y de superficie.

Comúnmente el análisis de los procesos de solidificación se lleva a cabo mediante la técnica de Análisis térmico diferencial.

1.3 ANÁLISIS TÉRMICO

1.3.1 ANÁLISIS TÉRMICO DIFERENCIAL (DTA)

El análisis térmico diferencial, DTA por sus siglas en inglés (*differential thermal analysis*) es una técnica donde la temperatura de la muestra de interés es comparada con la que presenta un material de referencia, básicamente el DTA consiste en la observación en los cambios del nivel de energía de una muestra en función de su temperatura; estos cambios son observados mediante el uso de termopares, conforme se presenta el enfriamiento y la solidificación los cambios en el nivel de energía de la muestra son medidos mediante la diferencia de voltaje que presentan los termopares durante las transformaciones de fase.

La muestra y su referencia tienen la misma temperatura hasta que ocurre algún evento térmico en la muestra, como la liberación del calor latente de fusión, la solidificación, cambio de fase, etc.

Mediante esta técnica se obtiene un gráfico de diferencias de temperatura de la muestra inicial y la muestra de referencia contra el tiempo.

la primera aplicación de esta técnica fue propuesta por Cibula y Crowsley, quienes propusieron emplear curvas de enfriamiento de una aleación de aluminio para obtener una muestra refinada.

Para emplear este método es necesario el uso de un graficador para la obtención de las curvas de enfriamiento, es por esto que dicha técnica no fue implementada hasta la década de los 70, donde el desarrollo de software permitió obtener la

curva de enfriamiento así como su primera derivada, lo cual permite obtener con mayor precisión los tiempos de inicio y término de la solidificación.

El empleo de la primera derivada fue aplicado por Yen y colaboradores quienes concluyeron que el pico de la primera derivada correspondía a la nucleación, y establecieron que existía una relación entre el pico de la curva y el grado de refinación obtenido.

A través del análisis térmico es posible detectar los cambios producidos por las diferentes transformaciones que sufre el metal durante su solidificación.

1.3.2 CALORIMETRÍA DIFERENCIAL DE BARRIDO

Conocida como DSC (*differential scanning calorimetry*), es una técnica experimental que permite obtener la cantidad de calor que absorbe o libera una sustancia cuando es calentada o enfriada a una velocidad constante en un intervalo de temperatura definido. Esta técnica es muy empleada en el campo de la ciencia e ingeniería de materiales debido a su elevado grado de sensibilidad y a su rápida velocidad de análisis.

Su objetivo principal consiste en estudiar la influencia de los cambios de temperatura sobre la microestructura de un material de estudio. Para estudiar estos cambios la calorimetría diferencial de barrido emplea dos muestras: una de ellas es la muestra a analizar y la otra es conocida como muestra de referencia, durante el experimento ambas muestras son introducidas en un horno en crisoles fabricados del mismo material; uno de los crisoles contiene la muestra a estudiar, mientras que el otro se mantiene vacío, ambas muestras son mantenidas a la misma temperatura. El control de la temperatura del sistema se realiza mediante termopares, los cuales envían su señal a una computadora.

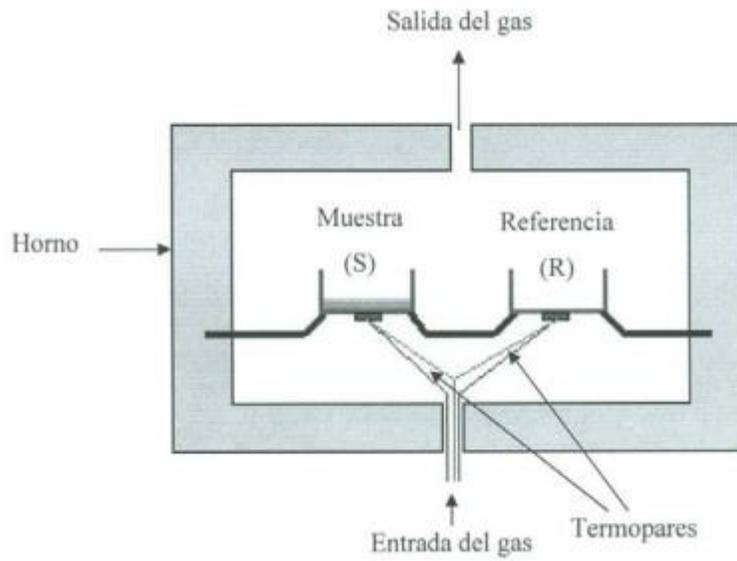


Figura 1.1.0 Esquema donde se muestra la técnica de calorimetría diferencial de barrido

Puede decirse que todas las transformaciones y reacciones que involucran un cambio de energía en el sistema de estudio pueden ser medidas mediante DSC.

Entre las diversas aplicaciones que presenta esta técnica se destacan las siguientes:

- Medición de la capacidad calorífica de un material
- Determinación de temperatura de transformación de fase
- Estabilidad térmica de los materiales
- Cinética de crecimiento de grano

1.4 ANÁLISIS DE CURVAS DE ENFRIAMIENTO ASISTIDO POR COMPUTADORA

El análisis de curvas de enfriamiento asistido por computadora es usado en el presente trabajo para generar información acerca de la cinética de solidificación y el calor latente liberado durante ésta.

En el presente trabajo será utilizado el método de análisis térmico de Newton (*Newton thermal analysis*); este método se basa en la ausencia de gradiente térmicos dentro de la muestra durante el proceso de enfriamiento y solidificación de la misma. Permite mediante el análisis de la curva de enfriamiento y su primera

derivada obtener información del calor latente de solidificación, el coeficiente de transferencia de calor, la evolución de la fracción solidificada, etc.

El método recibe este nombre, debido a que se supone enfriamiento newtoniano durante la solidificación; esto implica que no hay gradientes térmicos dentro del sistema.

1.4.1 MÉTODO DE NEWTON (NTA, NEWTON THERMAL ANALYSIS).

En el presente trabajo se mostrará la utilidad del método de Newton para la determinación de las propiedades termofísicas del sistema de estudio, siendo éstas el calor latente de solidificación, la evolución de la fracción sólida con respecto del tiempo y la obtención del coeficiente global de transferencia de calor

Como se menciona anteriormente el análisis de curvas de enfriamiento es una herramienta que ha tomado mucha importancia para el control de la formación de microestructuras en aleaciones durante su solidificación, ya que existe una correlación entre los cambio de pendiente de la curva de enfriamiento y la microestructura que se solidifica.

El método más simple de análisis de curvas de enfriamiento es el método de análisis térmico de Newton.

El procesamiento numérico del método de Newton se lleva a cabo analizando la primera derivada de la curva de enfriamiento, con el objetivo de obtener información acerca del calor latente de solidificación, la cinética de solidificación, y realizar una estimación de la cantidad y el tipo de microconstituyentes que se forman durante la solidificación.

La caracterización de los microconstituyentes comúnmente se realiza con microscopia ya sea ésta óptica o electrónica.

La metodología para llevar a cabo el análisis mediante el método de Newton es:

- obtener la primera derivada de la curva de enfriamiento $\left(\frac{dT}{dt}\right)$ con respecto del tiempo.

-Mediante la obtención de la primera derivada es posible determinar con precisión los tiempos de inicio de solidificación (tss) y el término de la solidificación (tfs). El éxito del método depende ampliamente de la llamada curva cero de Newton (ZN), que se definirá a continuación.

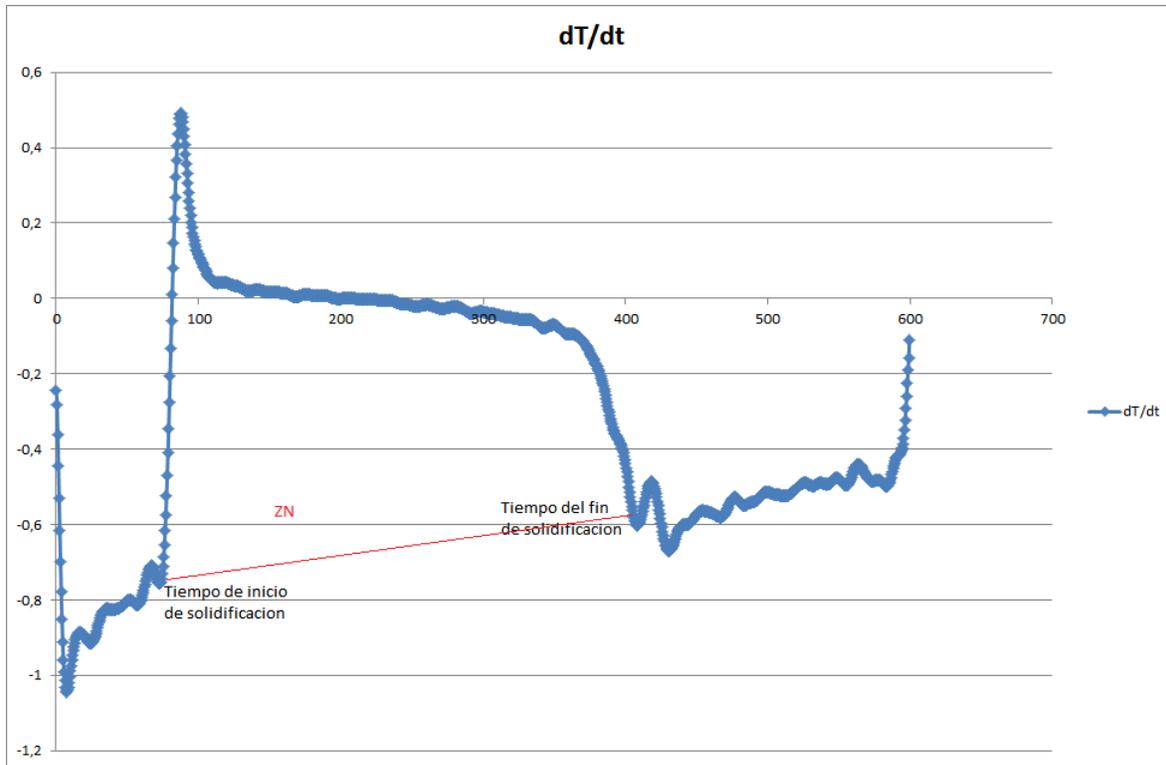


Figura 1.2.0 primera derivada de la curva de enfriamiento y la curva cero de Newton

La curva cero es una curva simulada que representa el comportamiento del sistema si no se presentara la liberación del calor latente, dicha curva se obtiene directamente de la primera derivada, usando las porciones que no son afectadas por la transformación de fase, la ecuación de la curva cero tiene la forma:

$$\frac{dT}{dt} = -\frac{hA(T-T_{\infty})}{mCp} \quad (1.1)$$

Donde:

$\frac{dT}{dt}$: Es la primera derivada de la curva de enfriamiento

h: Es el coeficiente global de transferencia de calor

A: área de transferencia de la pieza

m: es la masa de la pieza

T_{∞} : Temperatura del medio

Cp: es la capacidad calorífica a presión constante.

La curva cero de Newton tiene un comportamiento exponencial que se representa mediante la siguiente ecuación:

$$\frac{dT}{dt} = ABEXP(Bt) \quad (1.2)$$

Una vez que se obtiene la curva de la primera derivada con respecto del tiempo se usa para obtener los parámetros A y B, que permiten la construcción la curva cero de Newton.

Las ecuaciones que representan a dichos parámetros se presentan a continuación:

$$B = \frac{\ln\left(\frac{T_{ini}}{T_{final}}\right)}{t_{ss}-t_{fs}} \quad (1.3)$$

Donde:

Tini: El valor de la primera derivada de la temperatura contra el tiempo al inicio de la solidificación

Tfinal: La primera derivada de la temperatura contra el tiempo al fin de la solidificación

tss y *tfs*: Los tiempos de inicio y fin de la solidificación

Y el valor de A se da como:

$$A = \frac{T_{ini}}{BEXP(B*t_{ini})} \quad (1.4)$$

Una vez que se tiene la primera derivada $\frac{dT}{dt}$ y la curva cero, así como los tiempos de inicio y fin de la solidificación, se puede obtener el calor liberado por unidad de volumen mediante la siguiente ecuación:

$$HF = Cp \int_{t_{ss}}^{t_{fs}} \left(\frac{dT}{dt} - ZN \right) * \Delta t \quad (1.5)$$

Donde:

Cp= Capacidad calorífica a presión constante en unidades de $\frac{J}{m^3 \cdot ^\circ C}$

$\frac{dT}{dt}$ = Velocidad de enfriamiento en $\frac{^{\circ}C}{s}$

ZN= curva cero de Newton

Δt = *paso de tiempo*

La evolución de la fracción sólida se calcula como:

$$f_s = \frac{c_p}{HF} \int_{t_{ss}}^t \left(\frac{dT}{dt} - ZN \right) dt \quad (1.6)$$

Para el cálculo de los valores anteriores, es necesario realizar métodos numéricos que permitan la obtención de la curva de enfriamiento teórica, la primera derivada y la curva cero; una vez que se obtienen se pueden obtener las propiedades termofísicas del sistema de estudio.

Para determinar la evolución de la fracción sólida durante la solidificación equiaxial se considera que:

- Todos los granos que han nucleado permanecen durante toda su solidificación y mantienen el mismo radio promedio durante su crecimiento.
- Los granos permanecen en la misma posición
- Los granos tienen morfología esférica

1.4.2 ANÁLISIS TÉRMICO DE FOURIER FTA (*FOURIER TERMAL ANALYSIS*)

Los fundamentos del análisis térmico de Fourier fueron dados por W. Longa. El método de Fourier asume que el mecanismo controlante de transferencia de calor es la conducción en un sistema metal-molde, por lo que la temperatura en cualquier región de la pieza y a cualquier tiempo puede conocerse a partir de resolver la ecuación de Fourier, también conocida como ecuación general de conducción con cambio de fase, la cual se presenta a continuación:

$$\rho v c_p \frac{\partial T}{\partial t} = \nabla(k \nabla T) + Q_s \quad (1.7)$$

Si se consideran propiedades termofísicas constantes para el sistema de estudio, la siguiente ecuación describe la velocidad de enfriamiento del proceso:

$$\frac{dT}{dt} = \alpha \nabla^2 T + \frac{Q_s}{c_p} \quad (1.8)$$

Donde:

α Es la difusividad térmica

C_p es la capacidad calorífica a presión constante

Q_s es el calor liberado durante la solidificación

La ecuación puede ser reescrita para determinar el calor generado durante la solidificación de la siguiente forma:

$$QS = Cp \frac{dT}{dt} - \alpha Cp \nabla^2 T \quad (1.9)$$

Donde:

$$ZF = \alpha \nabla^2 T \quad (1.10)$$

ZF es la curva cero de Fourier que sirve de base para el cálculo de los parámetros cinéticos que caracterizan al sistema. Además la curva cero de Fourier representa la velocidad de enfriamiento del termopar más cercano del eje de simetría si en esta zona no se efectuara la solidificación.

A diferencia del método de Newton en el cual se requiere un solo termopar, en el método de Fourier se emplean dos termopares cada uno en diferente posición para tomar en cuenta el gradiente térmico de las muestras.

1.5 MODELADO INVERSO DE LA TRANSFERENCIA DE CALOR: OBTENCIÓN DEL COEFICIENTE GLOBAL DE TRANSFERENCIA DE CALOR EN FUNCIÓN DE LA TEMPERATURA

Este método permite obtener el coeficiente global de transferencia de calor como una función de la temperatura. Cada curva de enfriamiento presenta variaciones en los datos obtenidos empleando termopares, debido a las variables involucradas en el proceso de solidificación tales como la cantidad de materia de cada muestra, la velocidad de enfriamiento, etc.

Se asume un enfriamiento Newtoniano por lo que el balance de energía que describe el enfriamiento de las muestras experimentales se expresa con la siguiente ecuación:

$$-hA(T - T_{\infty}) = mCp \frac{dT}{dt} \quad (1.11)$$

Para la obtención del coeficiente de transferencia de calor usamos la siguiente ecuación:

$$h = \frac{-mcp \frac{dT}{dt}}{A(T-T_{\infty})} \quad (1.12)$$

A partir de la curva de enfriamiento experimental se obtiene la primera derivada en función del tiempo y se determina mediante la ecuación 1.12 para cada tiempo el coeficiente global de transferencia de calor operante en el sistema generándose de esta manera para cada tiempo y temperatura, un valor de h.

Se grafica h en función de la temperatura, se eliminan las variaciones iniciales y finales, así como la distorsión provocada durante solidificación por el cambio de fase y la ecuación que describe a h en función de T es obtenida mediante numerical fitting usando un software conocido como **TCWIN** para realizar un ajuste numérico, se obtiene h(T)

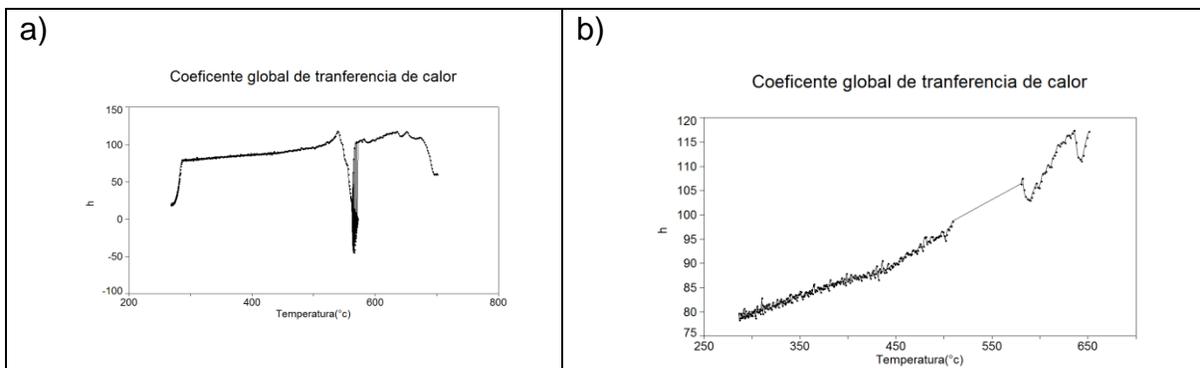


Figura 1.3.0 a) Gráfico obtenido para el coeficiente global de transferencia de calor en función de la temperatura b) gráfico obtenido una vez que se eliminaron las discontinuidades debidas a las transformaciones de fase.

1.6 OBTENCIÓN DE PARÁMETROS DE CRECIMIENTO DE GRANO.

Existen muchas metodologías que nos ayudan a entender cómo es el crecimiento de grano a partir de la determinación de parámetros preexponencial y exponencial. Para fines de este trabajo se calcularán dos coeficientes que explican la cinética de crecimiento de grano siendo estos el parámetro μ y n , dichos coeficientes se obtendrán empleando dos métodos diferentes.

Para modelar la rapidez de crecimiento de grano se emplea la siguiente ecuación:

$$\frac{dR}{dt} = \mu \Delta T^n \quad (1.13)$$

En la cual:

$$\frac{dR}{dt} = \text{La razón de crecimiento de los granos con respecto al tiempo}$$

μ y n son los parámetros preexponencial y exponencial que se desean encontrar

ΔT Es el subenfriamiento

Para calcular el valor de los parámetros pre exponencial y exponencial es necesario postular un modelo que conecte el número y las dimensiones de los granos como una función de la fracción sólida y el tiempo.

1.6.1 MÉTODO DE DEGAND

En los experimentos que llevo a cabo Degand para la determinación del parámetro μ , asumió que el parámetro n tiene un valor constante de 2, dichos experimentos fueron realizados para el caso de aleaciones aluminio silicio que son el caso de estudio del presente trabajo. Utilizó tanto la solidificación continua como la solidificación interrumpida, en el primer caso interrumpiendo la solidificación mediante la realización de un temple a muestras semilíquidas, después del temple cuantificó los granos y aplicó los resultados a la ecuación anterior.

En el caso de solidificación continua, dejó concluir el proceso de enfriamiento y solidificación, midió el radio de grano promedio, y aplico un criterio de fin de crecimiento de los granos cuando la fracción sólida alcanzara el valor de 0.74, ya que, según Degand este es el valor al cual ocurre el empalmamiento de los núcleos

Una vez que se obtuvieron datos de la fracción sólida en función del tiempo, determinó un intervalo en el cual se podía integrar el subenfriamiento, para calcular el parámetro preexponencial.

Para el parámetro preexponencial μ , se usa la siguiente ecuación, la cual se resuelve por el método de separación de variables:

$$dr = \mu (\Delta T_E)^2 dT \quad (1.14)$$

Resolviendo la ecuación diferencial anterior, se obtiene que la expresión para obtener el parámetro es:

$$\mu = \frac{R^-}{\int_{t_{ss}}^{t_{fs=0.74}} (\Delta T)^2 dt} \quad (1.15)$$

Donde:

R = radio promedio de grano

ΔT es el subenfriamiento evaluado en el intervalo entre el inicio de la solidificación y fracción sólida con valor de 0.74

1.6.2 MÉTODO DE CRECIMIENTO LIBRE.

En el método de crecimiento libre, a diferencia del método de Degand, se asume que la fracción sólida alcanza su valor máximo, cuando se alcanza la máxima recalescencia en la curva de enfriamiento, este es el punto en el cual la meseta eutéctica llega a su máxima temperatura.

Al igual que en el método de Degand los núcleos, se consideran como esferas sólidas, pero este método considera el empalmamiento de las esferas.

La fracción sólida sigue la siguiente ecuación:

$$f_s = \frac{V_s}{V_{total}} = \frac{4}{3} \pi N R^3 \quad (1.16)$$

Donde:

N = Es la densidad de nucleos por unidad de volumen

R = Radio promedio de los nucleos

Esta ecuación también es implementada en el método de Degand; sin embargo al considerar el empalmamiento la ecuación se modifica de la siguiente manera:

$$f_s = 1 - \exp\left(-\frac{4}{3} \pi N R^3\right) \quad (1.17)$$

La ecuación 1.17 recibe el nombre de ecuación de Johnson-Mehl-Avrami-Kolmogorov.

Para obtener los parámetros de μ y n , el método de crecimiento libre usa un método gráfico, el cual consiste en linealizar la ecuación 1.13 mediante la

aplicación de logaritmos, obteniendo la siguiente forma, la cual es la forma de un línea recta donde la pendiente es el valor del parámetro n y la ordenada al origen es el logaritmo natural del parámetro μ .

$$\ln \frac{dR}{dt} = \ln \mu + n \ln \Delta T \quad (1.18)$$

Para el empleo de este método se calcula el valor del radio en los puntos de máximo subenfriamiento y máxima recalcencia

$$R = \frac{3fs^{\frac{1}{3}}}{4\pi N} \quad (1.19)$$

Donde:

$fs = \text{Fracción sólida}$

$N = \text{es la densidad de núcleos por unidad de volumen}$

Para obtener la derivada del radio de nucleación con respecto al tiempo se usa el método de diferencias finitas divididas, iniciando con el valor de radio en el punto de máximo subenfriamiento y terminando en el punto de máxima recalcencia, de igual manera el delta de temperatura se toma entre estos dos puntos y finalmente se obtiene una función lineal que nos permitirá conocer los parámetros de crecimiento μ y n .

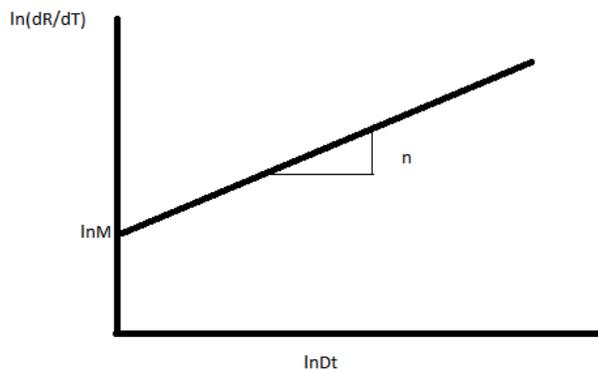


Figura 1.3.1 empleo del método de crecimiento libre para la obtención de los parámetros cinéticos de crecimiento de grano μ y n

1.7 EL SISTEMA ALUMINIO SILICIO

Las aleaciones Al-Si tienen una alta importancia comercial ya que son resistentes a la corrosión, presentan una excelente fluidez y soldabilidad, por lo tanto el control de las microestructuras obtenidas es muy importante para el funcionamiento adecuado de sus productos terminados.

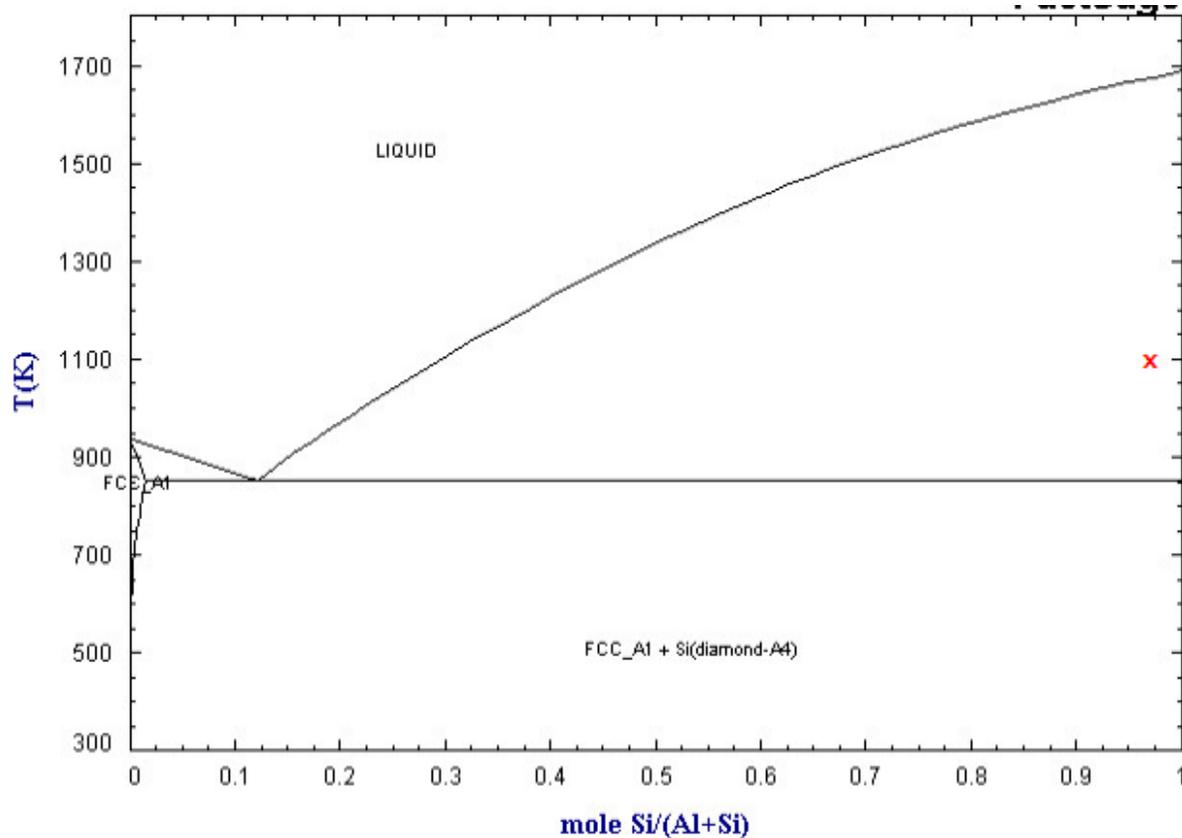


Figura 1.4.0 Diagrama de fases Aluminio-Silicio

La solubilidad máxima del silicio en aluminio está en el rango de $1.5\% \pm 0.1$, a la temperatura eutéctica, la solubilidad decrece hasta 0.05%.

Reacción eutéctica:



Debido a que el silicio y el aluminio tienen densidades similares, a la hora de adicionar silicio al aluminio la densidad no cambia de manera significativa.

Las propiedades mecánicas de las aleaciones Al-Si, dependen de la distribución de las partículas de silicio en la matriz de aluminio; en las aleaciones eutécticas se puede apreciar una microestructura, en la que las partículas de silicio se precipitan como hojuelas. En la aleación sin modificar estas partículas son frágiles y reducen la ductilidad de la pieza.

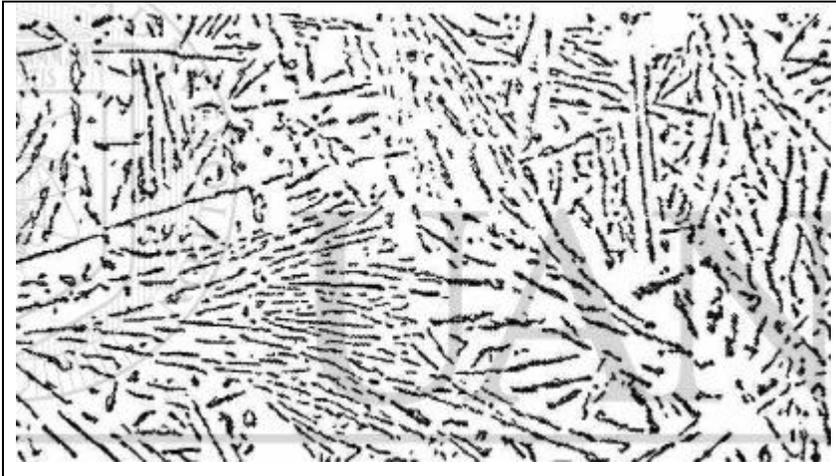


FIGURA 1. 4.1 Microestructura de una aleación Al-12.5%Si a 200x, se observa la matriz de aluminio y el silicio eutéctico que se precipita en forma acicular

1.7.1 MODIFICACIÓN DE ALEACIONES Al-Si

La reducción del tamaño de partícula en la microestructura Al-Si se conoce como modificación. Se han desarrollado diversos métodos para la modificación de la aleación Al-Si.

La modificación se emplea para mejorar las propiedades mecánicas de la aleación, siendo la aleación aluminio silicio, una aleación de importancia industrial.

El fenómeno de modificación no se entiende del todo, aunque se cree que dicho fenómeno se produce por limitación del crecimiento rápido de la aleación líquida, que a su vez inhibirá el crecimiento de la fase silicio.

1.7.2 TIPOS DE MODIFICACIÓN.

Modificación por enfriamiento rápido.

El enfriamiento rápido causa un cambio en las condiciones de equilibrio del sistema, incrementando la velocidad de enfriamiento, por lo tanto, se modifica la temperatura y composición del eutéctico.

El incremento en la velocidad de enfriamiento provoca una reducción del espaciamiento de las agujas de silicio en la matriz de aluminio.

Modificación por adición

Consiste en agregar un elemento aleante en pequeñas proporciones para modificar la morfología del precipitado de silicio, no se sabe a ciencia cierta cuál es el mecanismo mediante el que se realiza este proceso, sin embargo, investigaciones recientes indican que el crecimiento de la fase silicio se ve afectada por la presencia de elementos como: Sr, K, P, Li, Mg, Na, Rb.

El agregar estroncio a la aleación Al-Si, se presentó una mejora en las propiedades, incluso con bajas cantidades de estroncio metálico, generalmente se añade entre el 0.02% y 0.04% de estroncio a la aleación.

El efecto final del estroncio en el sistema Al-Si, hace que la aleación resultante sea menos fibrosa y esté menos dispersa, logrando así una mejora de sus propiedades mecánicas.

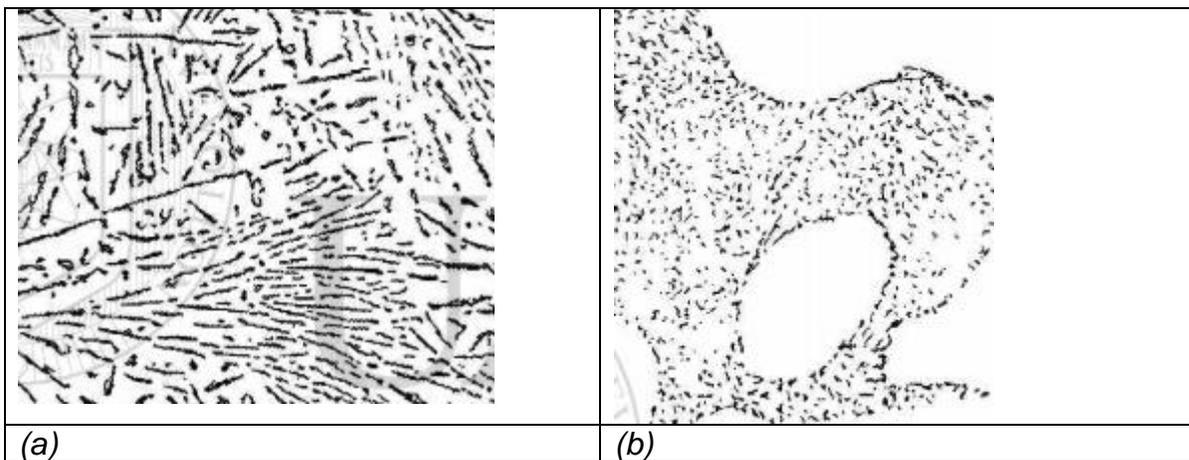


FIGURA1. 5.0. (a) Aleación Al-Si sin modifica, el eutéctico se precipita como agujas en la matriz de aluminio;(b) Aleación Al-Si modificada con estroncio, donde la fase silicio se precipita en una forma más fibrosa

MODIFICACIÓN EUTÉCTICA.

La fase silicio juega el papel más crítico en la modificación. El silicio crece de una manera en la cual se precipita en cristales con forma de aguja, y sólo es capaz de crecer en ciertas direcciones cristalográficas específicas. El silicio sin modificar se presenta en forma de placas planas sin ramificaciones.

Las fibras de eutéctico son capaces de doblarse, curvarse, y dividirse para crear una microestructura fina.

Desde principio de los años 80 el análisis de curvas de enfriamiento se ha aceptado para el análisis de la función y solidificación de aleaciones de aluminio.

Cuando se agregan modificadores, la temperatura eutéctica se reduce por lo menos 10°C, y así la temperatura de la meseta eutéctica se utiliza como base para controlar la modificación.

Recientemente Backreud, Chai y Tamminen publicaron un análisis térmico para diferentes aleaciones de aluminio solidificadas a diferentes velocidades de enfriamiento.

1.8 OBJETIVOS

1.8.1 GENERAL

Proponer y comprobar la pertinencia de una metodología que permita, a partir del procesamiento de información experimental, incluyendo curvas de enfriamiento y la densidad de núcleos por unidad de volumen obtenida por método metalográfico, generar datos de entalpia de solidificación, evolución de la fracción sólida, coeficiente global de transferencia de calor, coeficientes cinéticos pre exponencial y exponencial de crecimiento de grano, para simular mediante un modelo mecanístico, la curva de enfriamiento de una aleación eutéctica durante su enfriamiento y solidificación en un molde metálico

1.8.2 PARTICULARES

- Implementar el método de Newton para la obtención del calor latente de solidificación y la evolución de la fracción sólida con respecto al tiempo.
- Elaborar e implementar en un programa de computo un modelo mecanístico que permita simular la curva de enfriamiento asociada con una aleación eutéctica al-si modificada durante su enfriamiento y solidificación en un molde metálico.
- Implementar los métodos de Degand y de crecimiento libre para obtener, a partir de la curva de enfriamiento, la evolución de la fracción sólida y la densidad de núcleos por unidad de volumen, valores numéricos para los coeficientes cinéticos de crecimiento de grano.
- Validar la metodología propuesta comparando curvas de enfriamiento experimental y simuladas

CAPÍTULO 2.0 MODELO MATEMÁTICO

En este capítulo se presenta el micromacro modelo que se empleó para realizar la simulación de las curvas de enfriamiento experimentales, así como las ecuaciones de balance para cada una de las etapas de enfriamiento y solidificación.

2.1 PLANTEAMIENTO DEL MODELO

Para elaborar el modelo se supone al sistema cómo una masa de metal, inicialmente líquida, que transfiere calor hacia sus alrededores durante su enfriamiento y solidificación.

Por consideraciones de similitud con las mediciones experimentales de curvas de enfriamiento, que son obtenidas de la señal de un termopar que ha sido introducido en el centro térmico del metal líquido, que esta contenido dentro de un molde metálico cilíndrico cuya tapa y base están aisladas térmicamente, esta masa cilíndrica de metal transfiere calor a sus alrededores a través de su área lateral.

En la Figura 2.1 se muestra un esquema del sistema bajo estudio. En esta figura se resalta que el flujo del calor presente, atraviesa una zona conocida como “air gap” (también conocida como resquicio) generada por la contracción de la muestra, en la cual el sistema de transferencia de calor es por radiación y convección, otra zona dada por el molde metálico, donde la transferencia será conductiva, y una última zona de transferencia a los alrededores, cuya transferencia de calor será una combinación de convección y radiación.

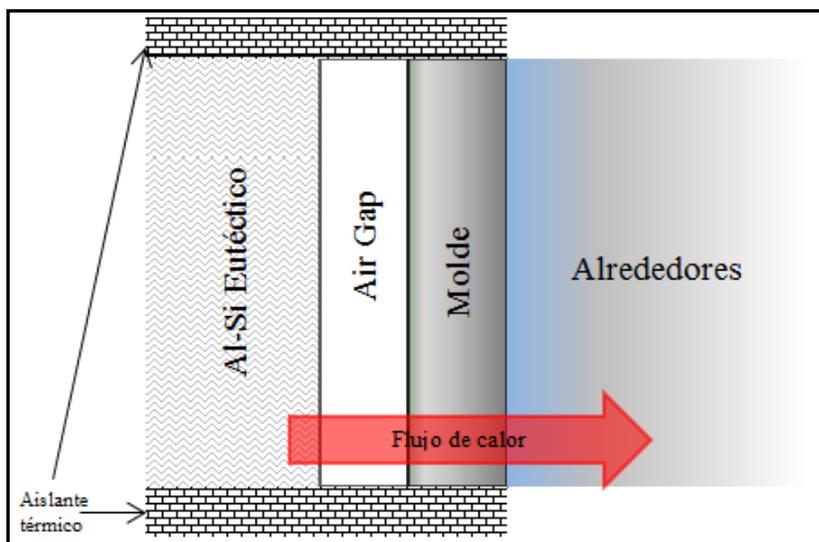


Figura 2.1 Sistema bajo estudio para el cálculo de la transferencia de calor.

El sistema bajo estudio involucra la presencia de tres resistencias térmicas: la asociada al air gap $\left(\frac{1}{h_a}\right)$, la asociada al molde de acero $\left(\frac{k_{\text{acero}}}{E}\right)$ y la asociada con la transferencia de calor por convección y radiación de la pared externa del molde hacia los alrededores $\left(\frac{1}{h_{\text{conv-rad}}}\right)$, éstas son capturadas a partir de mediciones experimentales de temperatura y con la aplicación del modelado inverso, el cual parte de la versión explícita del modelo, aplicando las ideas básicas descritas por A. García. Para la simplificación del sistema se usó una resistencia global que es expresada con la siguiente ecuación:

$$R_{\text{glob}} = \left(\frac{1}{h_{\infty}}\right) = \left(\frac{1}{h_a}\right) + \left(\frac{k_{\text{acero}}}{E}\right) + \left(\frac{1}{h_{\text{conv-rad}}}\right) \quad (2.0)$$

Donde h_{∞} es un coeficiente global combinado de transferencia de calor que describe el transporte de energía por radiación y convección de la muestra hacia sus alrededores, h_a es el coeficiente de transferencia que se da en el air gap, k_{acero} el coeficiente de conducción térmica del acero empleado como molde, E es el espesor del molde, y $h_{\text{conv-rad}}$ es el coeficiente de transferencia de calor hacia los alrededores en forma de convección y radiación.

Para realizar el micromacro modelo se asumió que el proceso de enfriamiento y solidificación se realiza en tres etapas como se muestra en la Fig. 2.2, en donde se observa que la curva de enfriamiento consta de tres partes, una asociada con cada etapa.

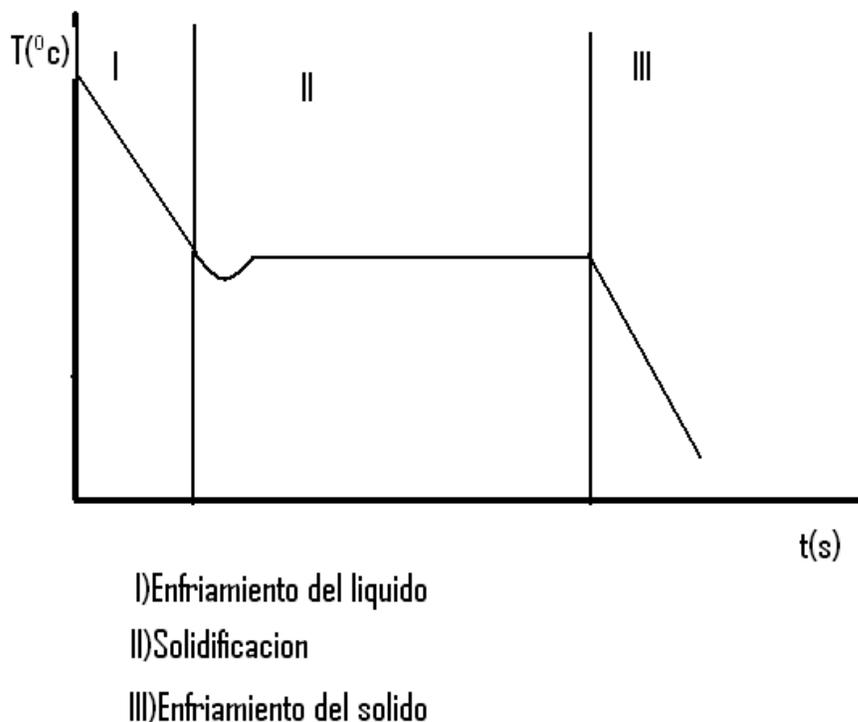


FIGURA 2.2 Curva típica de enfriamiento

La estrategia seguida para generar el modelo consistió en: aplicar un balance global de energía para el sistema en cada etapa, resolver siguiendo el orden cronológico natural del proceso la ecuación diferencial resultante, conocer la evolución de la temperatura en función del tiempo con base en dicha resolución, y simular con esto la curva de enfriamiento asociada al proceso bajo estudio.

En el caso de la etapa de solidificación de la aleación, se empleó un micromacro modelo de solidificación. A continuación se muestran los detalles más importantes involucrados en el desarrollo del modelo.

i) Enfriamiento del líquido.

En esta región de la curva de enfriamiento no existe solidificación solo se produce el enfriamiento de la aleación desde la temperatura de liquidus hasta la temperatura eutéctica, donde comienzan a formarse las primeras partículas de sólido, por medio de nucleación.

Para esta parte de la curva se realizó un balance macroscópico de energía térmica; de la siguiente manera:

$$\text{Entrada} + \text{Generación} = \text{Salida} + \text{Acumulación}$$

En el sistema no existen entradas, solamente el sistema transfiere energía térmica con sus alrededores por lo tanto:

$$-\text{Salida} = \text{Acumulación}$$

En términos del sistema de estudio:

$$\text{Flujo de calor que abandona el sistema} = \text{Cambio de entalpía del sistema}$$

$$-hA(T - T_{\infty}) = mC_p \frac{dT}{dt} \quad (2.1)$$

Donde:

h = coeficiente global de transferencia de calor

A = Área de transferencia

T = Temperatura del sistema

T_{∞} = Temperatura de los alrededores

m = masa de la aleación bajo estudio, contenida en el molde metálico

C_p = Calor específico del metal

Del balance obtenemos una ecuación diferencial ordinaria, ya que la temperatura sólo es función del tiempo, esta ecuación se puede resolver fácilmente por el método de variables separables. Como es una ecuación diferencial de orden uno se requiere de una condición inicial, se empleó la siguiente condición inicial, donde T_{mo} es la temperatura inicial del metal y t es el tiempo:

$$t = 0 \quad T = T_{mo} \quad \text{Condición Inicial}$$

Resolviendo se obtiene la siguiente solución analítica:

$$T = T_{\infty} + (T_{mo} - T_{\infty}) \exp\left(\frac{-hAt}{mC_p}\right) \quad (2.2)$$

Sin embargo, esta ecuación no es suficiente para modelar la curva completa, pues, es una solución analítica, y no considera la etapa de solidificación en la que

se presenta la nucleación del sólido, por lo cual es necesario emplear métodos numéricos, en este caso se empleará el método de Euler:

$$T^{t+\Delta T} = T^T + \left(\frac{dT}{dt}\right) * \Delta t \quad (2.3)$$

Donde:

$T^{t+\Delta t}$ = Temperatura al tiempo futuro

T^t = Temperatura al tiempo presente

$\left(\frac{dT}{dt}\right)$ = La velocidad de enfriamiento

Δt = Paso de tiempo

De la ecuación 2.1 obtenemos que:

$$\frac{dT}{dt} = \frac{-hA(T-T_{\infty})}{mCp} \quad (2.4)$$

Sustituyendo en 2.3 obtenemos que:

$$T^{t+\Delta T} = T^T + \left(\frac{-hA(T-T_{\infty})}{mCp}\right) * \Delta t \quad (2.5)$$

La ecuación 2.5 es la que se introducirá al programa de cómputo para obtener la curva de enfriamiento, en la región correspondiente al enfriamiento del líquido.

Podemos observar que tal como el gráfico nos muestra tiene la forma de la ecuación de una línea recta $y = mx + b$, con pendiente negativa.

ii) Solidificación de la aleación.

De igual forma que en la fase anterior se realiza el balance global:

$$\text{Entrada} + \text{Generación} = \text{Salida} + \text{Acumulación}$$

No hay entradas de calor al sistema, sin embargo, en este caso existe generación debido al calor latente que se genera durante la solidificación:

$$-\text{salida} + \text{Generación} = \text{Acumulación}$$

$$-hA(T - T_{\infty}) + Lf \frac{dfs}{dt} = mCp \frac{dT}{dt} \quad (2.6)$$

Donde:

$L_f = \text{Calor Latente} = \rho \Delta H_f$

$\frac{dfs}{dt}$ = La rapidez con la que aumenta la fracción sólida con respecto al tiempo

De igual forma se emplea el método de Euler para resolver la ecuación 2.6

$$\frac{dT}{dt} = \frac{-hA(T-T^\infty)}{mC_p} + \frac{\Delta H_f}{C_p} \frac{dfs}{dt} \quad (2.7)$$

Donde aplicando el método de diferencias finitas para la derivada de la evolución de la fracción sólida con respecto del tiempo obtenemos:

$$\frac{dfs}{dt} = \frac{f_s^{t+\Delta t} - f_s^t}{\Delta t} \quad (2.8)$$

Introduciendo la expresión 2.8 en la ecuación 2.7, se obtiene una expresión que nos permitirá modelar la evolución térmica del sistema con respecto tiempo, y la evolución de la fracción sólida en el sistema:

$$T^{t+\Delta t} = T^t + \left(\frac{-Ah(T-T^\infty)}{mC_p} + \frac{\Delta H_f}{C_p} \left(\frac{f_s^{t+\Delta t} - f_s^t}{\Delta t} \right) \right) * \Delta t \quad (2.9)$$

Para poder resolver la ecuación anterior en el programa de cómputo requerimos información adicional relacionada con la evolución de la fracción sólida en función del tiempo para lo cual se emplea un micromodelo de solidificación que asume la solidificación simultánea de N granos esféricos del mismo radio r_g creciendo a la velocidad de crecimiento dr/dt que depende del subenfriamiento de acuerdo con:

$$\frac{dr_g}{dt} = \mu \Delta T^n \quad (2.10)$$

Donde μ y n son los coeficientes de crecimiento de grano preexponencial y exponencial, respectivamente y que serán determinados a partir de la información experimental y donde el subenfriamiento está definido por:

$$\Delta T = T_{eu} - T^t \quad (2.11)$$

Donde T_{eu} es la temperatura eutéctica y T^t es la temperatura en cualquier instante de tiempo

Ahora empleamos una vez más el método de Euler para calcular el radio de nucleación en cada uno de los pasos de tiempo:

μ Es un parámetro preexponencial a determinar.

$$r_g^{t+\Delta t} = r_g^t + \frac{dr_g}{dt} * \Delta t \quad (2.12)$$

Ahora se procede a calcular la fracción sólida extendida eutéctica en el tiempo futuro XE usando la ecuación:

$$Xe^{t+\Delta t} = \frac{4}{3}\pi N r g^{t+\Delta t^3} \quad (2.13)$$

Donde N es la densidad de granos por unidad de volumen, el cual se determinara posteriormente al realizar el análisis metalográfico de la probeta macroatacada. Y finalmente se aplica la ecuación de Johnson-Mehl-Avrami para determinar la nueva fracción sólida en el tiempo $t+\Delta t$:

$$f_s^{t+\Delta t} = 1 - \exp(-Xe) \quad (2.14)$$

Empleando este resultado y la ecuación 2.8 es posible evaluar la velocidad de solidificación y aplicar el método de Euler para obtener la nueva temperatura, de acuerdo con la ecuación (2.9).

iii) Enfriamiento del sólido

Esta etapa inicia cuando la aleación está completamente solidificada, es decir, cuando la fracción sólida vale uno y ha terminado la meseta eutéctica. Una vez que se pasa la meseta la pieza comienza a enfriarse, desde de la temperatura de fin de solidificación hasta alcanzar equilibrio con sus alrededores.

Al igual que en las dos etapas anteriores se aplica el balance global de energía:

$$\text{Entrada} + \text{Generación} = \text{Salida} + \text{Acumulación}$$

$$-hA(T - T_\infty) = mCp \frac{dT}{dt} \quad (2.15)$$

Se resuelve empleando el método de Euler y se obtiene una ecuación igual a la 2.5.

$$T^{t+\Delta T} = T^T + \left(\frac{-Ah(T-T_\infty)}{mCp} \right) * \Delta t \quad (2.16)$$

CAPÍTULO 3.0 EXPERIMENTACIÓN

En este capítulo se presenta el arreglo experimental construido para la obtención de curvas de enfriamiento de una muestra cilíndrica de metal, inicialmente líquida y contenida en un molde metálico precalentado, el cual está aislado térmicamente en su tapa y en su base, y se menciona el procedimiento seguido durante la experimentación. También se mencionan los aspectos relevantes relacionados con la técnica metalográfica para el conteo de granos de la aleación solidificada.

3.1 ARREGLO EXPERIMENTAL.

Se usó el método de adquisición de datos obtenidos por computadora (computer aided cooling curve analysis). Para la aplicación del método de Newton se colocó un termopar tipo K de calibre 30 en el centro de la pieza. El aislamiento térmico que se utilizó fue asbesto entre la tapa superior del crisol y la tapa inferior del crisol.

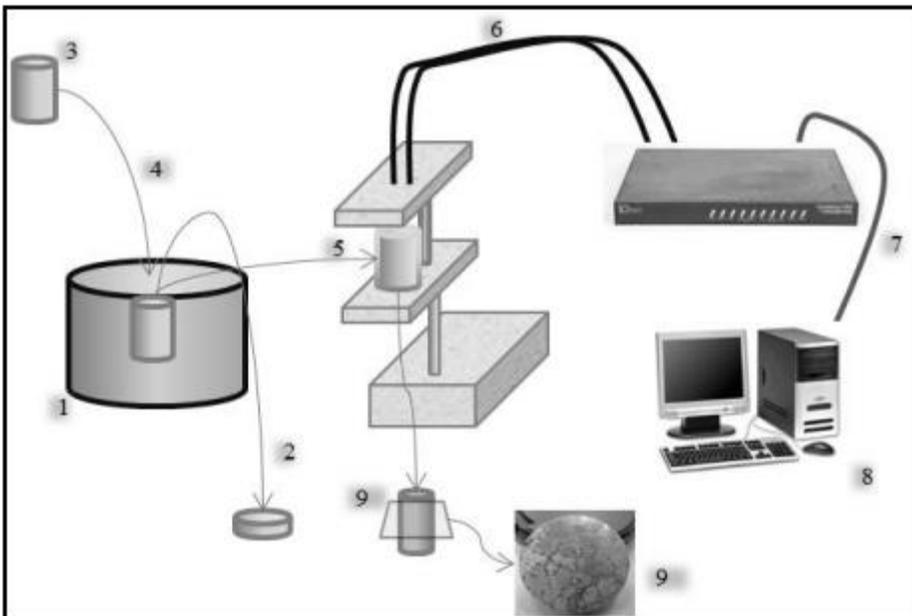


Figura 3.0 representación esquemática del procedimiento experimental, y se encuentran numerados los pasos a seguir. 1) se monta el dispositivo 2) se coloca el aislamiento térmico en la tapa y en la base 3) se coloca el crisol 4) se vacía la aleación líquida 5) el sistema se conecta al adquisidor de datos mediante los termopares 7 y 8) se registran los datos de tiempo vs temperatura 9) finalmente se extrae la aleación solidificada y se le realiza preparación metalográfica para revelar la microestructura.

Para obtener datos de un sistema real Al-Si-Sr y poder realizar la comparación con los resultados obtenidos mediante el modelo matemático, presentado anteriormente se realizaron los siguientes experimentos:

Se fundió una cantidad de aleación eutéctica Al-Si modificada con estroncio a 200 ppm, la cual fue vaciada en crisoles de acero inoxidable aislados térmicamente con asbesto en las caras superior e inferior para disminuir la presencia de gradientes térmicos hasta hacerla despreciable, se asume que el mecanismo de transporte de calor dentro del metal es la conducción, y la convección en la parte que está en contacto con el medio externo, el cual mantiene una temperatura constante de 25°C.

La aleación fue desgasificada con argón durante ocho minutos, mediante el uso de una lanza de acero inoxidable agujerada en el fondo y recubierta con óxido de zirconio. Se desgasificó antes de la adición del estroncio para evitar pérdidas de materia, ya que el estroncio presenta alta reactividad química. El tiempo de disolución del estroncio es de 3 a 5 minutos.

La adición de estroncio fue realizada mediante una aleación maestra Al-10%Sr.

El estroncio fue introducido en una campana cubierta con pintura de óxido de zirconio para evitar que se quedara atrapado en la escoria, ya que permanece en la superficie al ser menos denso.

Para comprobar que se tenía la composición deseada(la composición eutéctica 12.6% de silicio y 200 ppm de estroncio), se realizaron pruebas de composición en un espectrómetro de emisión atómica. Una vez que se obtuvo la composición deseada se precedió a la obtención de las curvas de enfriamiento.

Las muestras para el análisis térmico fueron tomadas sumergiendo moldes cilíndricos de acero inoxidable en la aleación fundida, las cuales permanecieron cerca de 30 segundos para permitir que los crisoles alcanzaran la temperatura de la aleación fundida.

Para la obtención de la curva de enfriamiento se colocó un termopar de aleación Cromel-Alumel, en el centro de la probeta, y, por medio de un software de adquisición de datos, se obtuvieron las mediciones de tiempo y temperatura para poder construir la curva de enfriamiento.

Para tomar las muestras se retiró la escoria generada en la superficie del metal líquido.

Para el análisis metalográfico las muestras solidificadas fueron seccionadas transversalmente, desbastadas hasta grado 1200 con carburo de tungsteno y pulidas a espejo en paño grueso y fino, usando suspension liquida de polvo de diamante como abrasivo.

El ataque químico se realizó con reactivo de Poulton, para relizar el ataque termoquimico es necesario calentar las muestras a 550°C durante diez minutos, ésto se hace para que el silicio comience a difundir y se precipite en las fronteras de grano.

La solución se preparó con 30% de ácido nítrico, 30% de ácido clorhídrico y 5% de ácido fluorhidrico, se prepararon 100 mL de solución, y los ácidos fueron agregados en orden de mayor a menor reactividad.

Antes de introducir las piezas a la mufla se les realizó una perforación con una broca de $\frac{1}{16}$ de pulgada, para asi poder monitorear la temperatura mediante un termopar tipo K.

CAPÍTULO 4. RESULTADOS Y DISCUSION

En este capítulo se presentan los resultados obtenidos experimentalmente y el procesamiento matemático que se les dió, mediante el empleo el método de Newton para la obtención de la entalpia de solidificación y la evolución de la fracción sólida con respecto del tiempo, así como las funciones que se obtuvieron para modelar el comportamiento del coeficiente de transferencia de calor en función de la temperatura.

Respecto a la cinética de solidificación, se analizan los valores obtenidos para los coeficientes preexponencial y exponencial de la cinética de crecimiento de grano mediante los método de Degand y crecimiento libre.

La información obtenida del tratamiento matemático de los datos experimentales será posteriormente alimentada a un programa de cómputo, para poder así validar los resultados obtenidos.

4.1 IMPLEMENTACIÓN DEL MÉTODO DE NEWTON Y RESULTADOS OBTENIDOS

La función de la curva de enfriamiento consiste en describir la evolución de la temperatura del metal líquido durante su enfriamiento y solidificación con respecto del tiempo. Como se mencionó anteriormente, se realiza la suposición de que el sistema sigue un enfriamiento de tipo newtoniano, lo cual excluye la presencia de gradiente térmicos. Mediante la implementación del método de Newton se obtendrá información acerca del calor latente de solidificación y la evolución de la fracción sólida.

El método de Newton es señalado como una herramienta matemática importante en la literatura para conocer y explicar cómo se desarrolla el proceso de solidificación de una aleación bajo diferentes condiciones de proceso. Los resultados obtenidos de las curvas de enfriamiento fueron tratados matemáticamente para obtener la primera derivada de la curva de enfriamiento usando el método de diferencias finitas divididas. Posteriormente se obtuvieron los coeficientes A y B que rigen el comportamiento de la curva cero de Newton, así como los datos adquiridos de cada una de las muestras de calor latente de solidificación (H_f) y la evolución de la fracción sólida con respecto al tiempo.

A continuación se muestran las propiedades del sistema bajo estudio con el que se trabajó, que, como se mencionó, es una muestra cilíndrica con aislamiento en las tapas.

Tabla 4.1 propiedades del sistema de estudio

Radio de la pieza(cm)	1.5
Cp (J/Kg)	1000
Paso de tiempo(Δt segundos)	0.5
Temperatura eutéctica teórica($^{\circ}$ C)	577
$K(\frac{w}{m \cdot k})$	70
Temperatura de colada($^{\circ}$ C)	700

Previamente al llenado de los moldes se le realizó a la aleación fundida un análisis de composición mediante un espectrómetro de emisión atómica; se obtuvieron los siguientes resultados:

Tabla 4.2 composición de la aleación de estudio.

%Si	%Sr	%Fe	%Cu	%Al	%Mn	%Mg	%Zn	%Cr	%Pb
12.4	0.010	0.264	0.046	$\leq 84.$	0.011	0.005	2.78	0.002	0.002
3	8	5	3	4	0	0	6	0	2

Se realizaron tres corridas para la aleación eutéctica modificada, en la figura 4.0 se puede apreciar que la temperatura eutéctica, se abate por lo menos 10° C con respecto al valor teórico para la aleación aluminio-silicio sin modificar, cuya temperatura eutéctica es de 577° C; dicha modificación de la temperatura eutéctica se debe a la adición de estroncio. Se puede observar que las tres curvas llegan a la temperatura eutéctica cerca de los 567° C, e inmediatamente después de alcanzarla se presenta la recalcancia; es aquí donde las curvas difieren en la longitud de la meseta eutéctica, posiblemente debido a variaciones en la masa de las muestras. Sin embargo, las tres alcanzan su término de solidificación muy cerca de los 300 segundos; posteriormente con la obtención de la primera derivada se obtendrá con mayor precisión los tiempo de inicio y término de la solidificación.

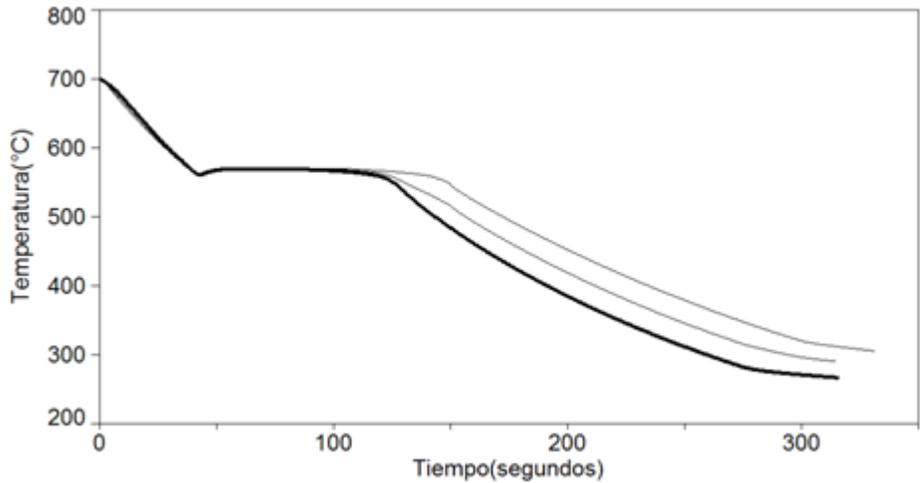


Figura 4.0 Curvas de enfriamiento obtenidas mediante el empleo de software

Se mencionó que se omitiría la presencia de gradientes térmicos dentro del sistema de estudio, por lo que resulta adecuado realizar un cálculo del número de Biot con los valores teóricos que se están trabajando. El número de Biot es un número adimensional que permite identificar si un sistema presenta o no gradientes térmicos, indica que tan grande es la diferencia entre la transferencia de calor por conducción y por convección; si el número de Biot es mayor que 0.1, habrá gradientes térmicos en el sistema, y si es inferior significa que el sistema no presenta gradientes.

$$Bi = \frac{h rp}{k} \tag{3.1}$$

Donde:

$h =$ coeficiente global de transferencia de calor en $\frac{w}{k m^2}$

$rp =$ radio de la pieza en metros con valor de 0.015m

$k =$ conductividad térmica del material $\frac{w}{m k}$

Si calculamos el Biot para el sistema de estudio empleando la ecuación 3.1 se obtiene lo siguiente:

$$Bi = \frac{\left(80 \frac{w}{km^2}\right)(0.015m)}{70 \frac{w}{mk}} = 0.0171$$

Es menor que 0.1, que es el valor umbral para la consideración de gradientes térmicos, por lo cual la aproximación de que el sistema no presenta gradientes no esta tan alejada del sistema real.

Como podemos observar en la figura 4.0, cada curva de enfriamiento es única; presentan la misma temperatura de colada, y la misma temperatura eutéctica (ya que la composición de la aleación no se modificó durante la experimentación). Las variaciones que podemos observar en las diferentes mesetas eutécticas son debidas a las variaciones de la cantidad de aleación que se fundió en cada una de las corridas.

En las curvas de enfriamiento obtenidas podemos apreciar las etapas que se mencionan en la figura 2.2 del capítulo 2: el enfriamiento del líquido hasta la temperatura eutéctica, la zona de subenfriamiento y la meseta de solidificación, así como, una vez terminada la solidificación, se observa el enfriamiento del sólido que sigue un comportamiento cuasi lineal desde los 400°C hasta la temperatura ambiente.

Los resultados obtenidos experimentalmente con el metodo de adquisicion de datos obtenidos por computadora se procesaron numericamente empleando el método de Newton para poder obtener para la aleación aluminio-silicio modificada su entalpía de solidificación correspondiente, así como la evolución de la fracción sólida con respecto al tiempo de cada una de las muestras.

Para la aplicación del método de Newton se empleó el método de diferencias divididas, mediante el uso de las siguientes formulas:

Primera derivada de la curva de enfriamiento para el primer punto, se toma la derivada hacia adelante:

$$\frac{dT}{dt} = \frac{T_{(t+\Delta t)} - T(t)}{\Delta t} \quad (3.2)$$

Derivada central para todos los puntos de la curva de enfriamiento que no son ni el primero ni el último:

$$\frac{dT}{dt} = \frac{T(t+\Delta t) - T(t-\Delta t)}{2\Delta t} \quad (3.3)$$

Y finalmente la derivada hacia atrás para el último dato de temperatura contra tiempo:

$$\frac{dT}{dt} = \frac{T(t) - T(t-\Delta t)}{\Delta t} \quad (3.4)$$

La obtención de la primera derivada permite determinar los tiempos de inicio y término de la solidificación.

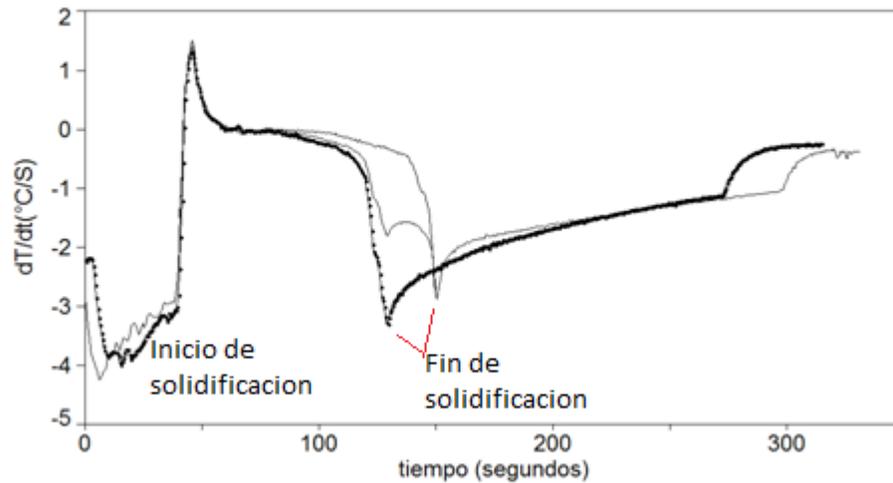


Figura 4.1 Primera derivada de la curva de enfriamiento de la aleación modificada donde se indican los tiempos de inicio y término de la solidificación.

En la figura 4.1 se muestran la primera derivada de la temperatura con respecto del tiempo para cada una de las curvas obtenidas experimentalmente. Una vez que se ha obtenido la primera derivada resulta sencillo identificar con precisión los tiempos de inicio y término de la solidificación, los cuales serán empleados en la obtención de la curva cero de Newton. El punto de inicio de la solidificación se distingue porque aquí comienza el pico de la derivada, cuando se ha terminado la solidificación el pico de la derivada vuelve descender.

Tabla 4.3 tiempos de inicio y término de la solidificación obtenidos experimentalmente para cada una de las tres corridas

Curva	Tiempo de inicio de solidificación(segundos)	Tiempo de fin de solidificación(segundos)
1	39	128.5
2	35.5	149
3	36.5	149

Usando las ecuaciones 1.10 y 1.11 que se presentaron en el capítulo 1 para poder calcular los valores de los parámetros A y B, los cuales están en función de los tiempos de inicio y término de solidificación, así como de los valores de la primera

derivada temporal en dichos puntos de la curva de enfriamiento, con esto se construye la curva Cero de Newton.

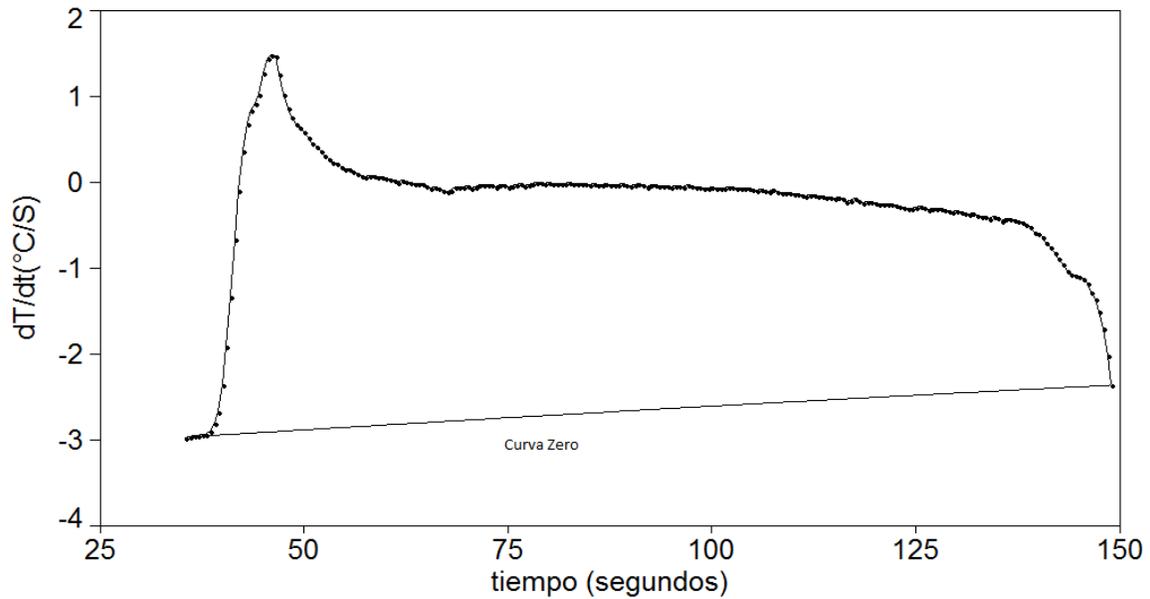


Figura 4.2 Primera derivada temporal de la curva y de enfriamiento y su respectiva curva cero de Newton obtenida con los tiempo de inicio y término de solidificación.

La curva cero de Newton es una estimación que representa el comportamiento que seguiría la derivada si no ocurriese la solidificación. Entre el inicio y el término de la solidificación se observa que la curva asciende a valores positivos hasta alcanzar un punto máximo, posteriormente desciende hasta llegar al término de la solidificación, el significado físico de este comportamiento es la transformación que sufre la aleación al alcanzar su máximo subenfriamiento y comienza a solidificar.

El significado físico del área que se encuentra bajo la curva entre la primera derivada y la curva cero de Newton, se muestra en la figura 4.4, dicha area esta asociada al calor latente de solidificación, el cual se determina al aplicar una integración numerica entre los puntos primero y final de la curva puede ser obtenido.

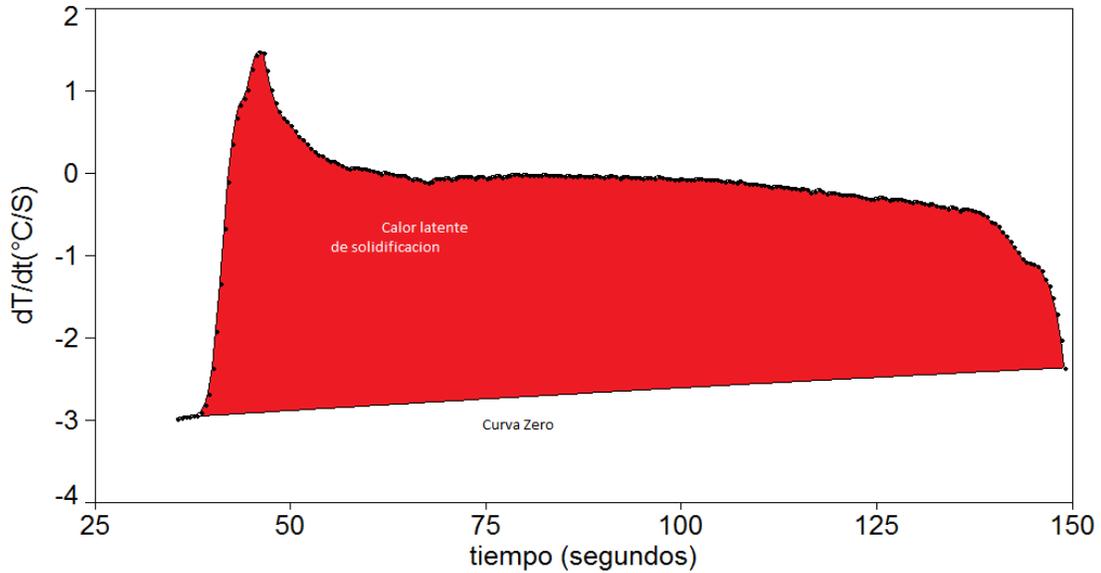


Figura 4.3 Significado físico del área bajo la curva de la primera derivada temporal de la curva de enfriamiento

Empleando la ecuación 1.5 que se muestra a continuación es posible calcular el valor de entalpía de solidificación para cada una de las muestras

$$H_f = CP \sum_{tis}^{tfs} \left(\frac{dT}{dt} - ZN \right) * \Delta t$$

Se obtuvieron los siguientes resultados:

Tabla 4.4 valores de entalpía de solidificación encontrada para cada una de las corridas

Curva	$HF \left(\frac{J}{Kg} \right)$
1	260211.8
2	274099.623
3	237643.751
Valor promedio	257318.391

Para obtener la evolución de la fracción sólida con respecto del tiempo, es necesario obtener previamente la primera derivada, posteriormente la curva cero, y finalmente los valores para el calor latente de solidificación. A continuación se muestran gráficos que permiten observar cómo es que evoluciona la fracción sólida con respecto del tiempo:

La evolución de la fracción sólida se calcula según la ecuación 1.6 del capítulo , la cual se presenta a continuación:

$$f_s = \frac{c_p}{HF} \int_{t_{ss}}^t \left(\frac{dT}{dt} - ZN \right) dt \quad (1.6)$$

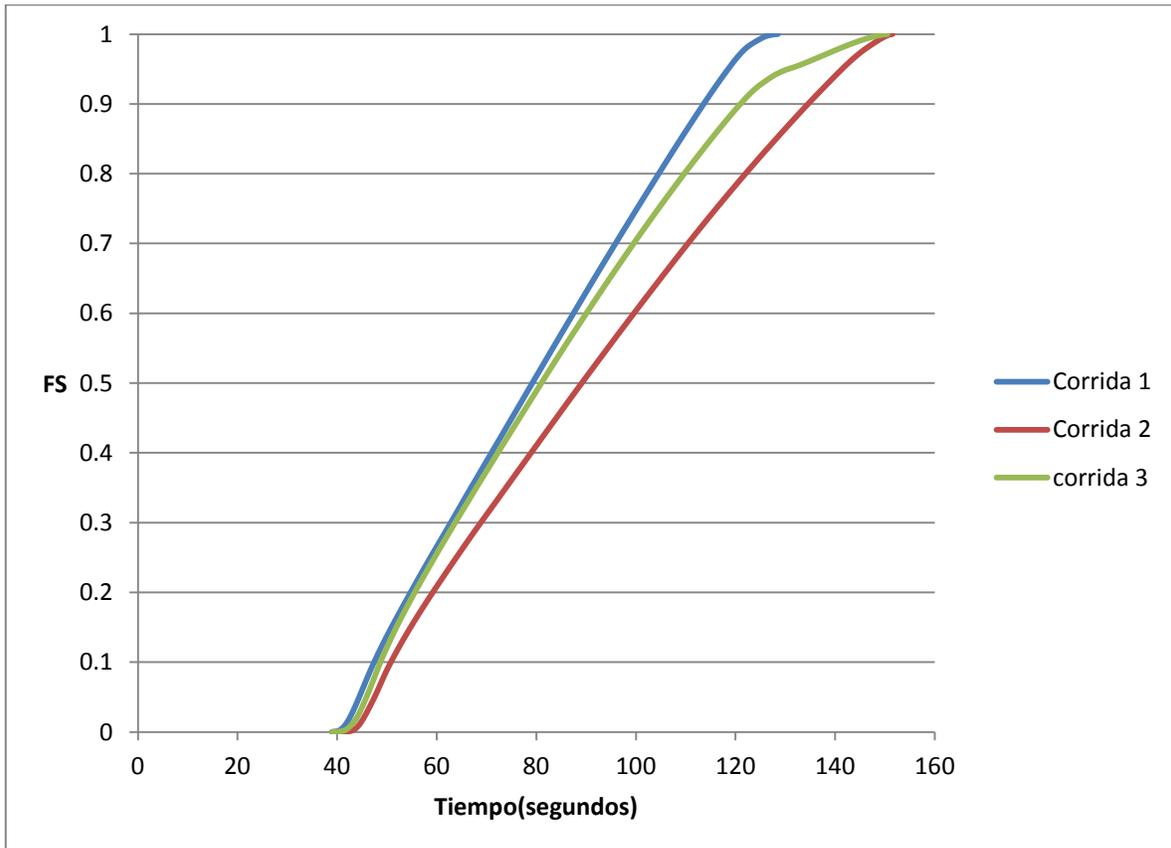


Figura 4.4 evolución de la fracción sólida con respecto al tiempo para las tres corridas

En la figura 4.4 se muestra cómo es que la fracción sólida empieza a avanzar en el tiempo de inicio de la solidificación, y sigue un comportamiento lineal hasta que alcanza su valor máximo que es de uno, este valor indica que toda la aleación ha terminado de solidificar; podemos observar que para cada una de las corridas que se realizaron los tiempos de inicio y término de la solidificación son ligeramente diferentes.

4.2 OBTENCIÓN DEL COEFICIENTE GLOBAL DE TRANSFERENCIA DE CALOR A PARTIR DE DATOS EXPERIMENTALES.

El objetivo de esta sección es la obtención de una función que describa la dependencia del coeficiente global de transferencia de calor en función de la temperatura; para ello es necesario realizar un balance global del sistema, y, en función de dicho balance, obtener una expresión para que el coeficiente global de transferencia de calor, simbolizado como h que pueda ser calculada a partir de la información experimental disponible.

Dicho balance se realizó en el primer capítulo de este trabajo, obteniendo para la determinación de h en función de temperatura la siguiente expresión:

$$h = \frac{-mcp \frac{dT}{dt}}{A(T - T_{\infty})}$$

La expresión anterior se utiliza para calcular el coeficiente global de transferencia de calor en función de la temperatura. Para realizar el cálculo se consideran la masa y el área de transferencia de calor, medidas experimentalmente, la capacidad calorífica, consultada de tablas de datos termodinámicos, como términos constantes, de manera que el coeficiente de transferencia de calor queda en función de la derivada temporal de la curva de enfriamiento y la temperatura del sistema, considerando T_{∞} que es la temperatura del medio que está en contacto con la pieza, también como constante.

Los resultados obtenidos en el procesamiento numérico fueron graficados y procesados a fin de obtener a h como una función de la temperatura, $h(T)$.

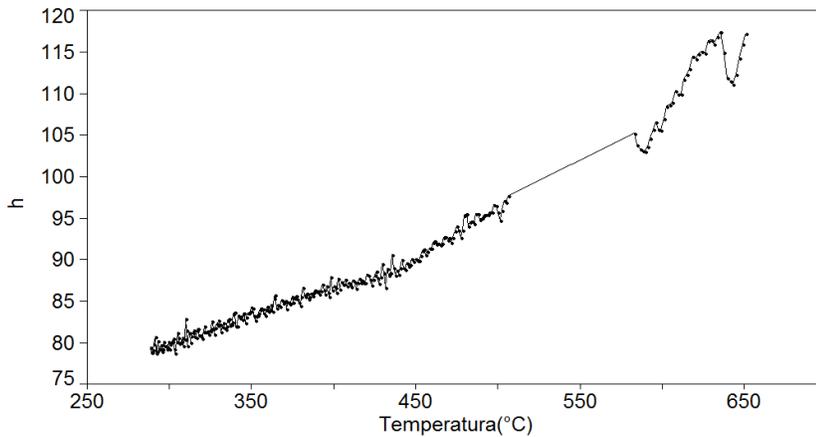


Figura 4.5. Gráfico de coeficiente de transferencia de calor en función de la temperatura una vez que se han eliminado las discontinuidades correspondientes al cambio de fase

En el gráfico anterior se observa que el valor de coeficiente de transferencia de calor aumenta de manera exponencial conforme aumenta la temperatura; este fue el comportamiento que se obtuvo una vez eliminadas las discontinuidades producidas por el cambio de fase. Para obtener una expresión para $h(T)$ se eliminan las discontinuidades, mediante un procesamiento de ajuste numérico (numerical fitting), se obtiene finalmente una función global que expresa los valores del coeficiente de transferencia de calor para el sistema, expresiones que posteriormente serán empleados en la simulación de las curvas de enfriamiento. Después de realizar el procedimiento anterior, se obtuvo que la función que mejor representa el comportamiento y que posee un mejor coeficiente de correlación es una función exponencial. En la siguiente tabla se muestran los valores de la función exponencial obtenida para cada una de las tres corridas con sus respectivos coeficientes de correlación.

Tabla 4.5 Funciones obtenidas para modelar el coeficiente de transferencia de calor en el sistema.

Corrida	Función h(T)	r ²
1	63.808 + 5.921exp($\frac{-T}{-297.315}$)	0.986
2	63.548 + 0.162exp($\frac{-T}{-114.145}$)	0.973
3	69.870 + 0.224exp($\frac{-T}{-120.136}$)	0.985

Los gráficos que se muestran a continuación son el resultado de eliminar los puntos correspondientes a las discontinuidades debidas a la solidificación, sin dicha discontinuidad se supone cómo sería el comportamiento de la función del coeficiente global de transferencia de calor si no se presentaran los cambios de fase.

Para encontrar las funciones se uso el procedimiento conocido como ajuste numérico y, con la ayuda de software, se realizó un análisis matemático para ver cuál era la función matemática que más se aproximaba a los valores reales obtenidos para coeficiente de transferencia de calor.

Los gráficos que se muestran a continuación son los resultados del ajuste numérico realizado para cada una de las corridas.

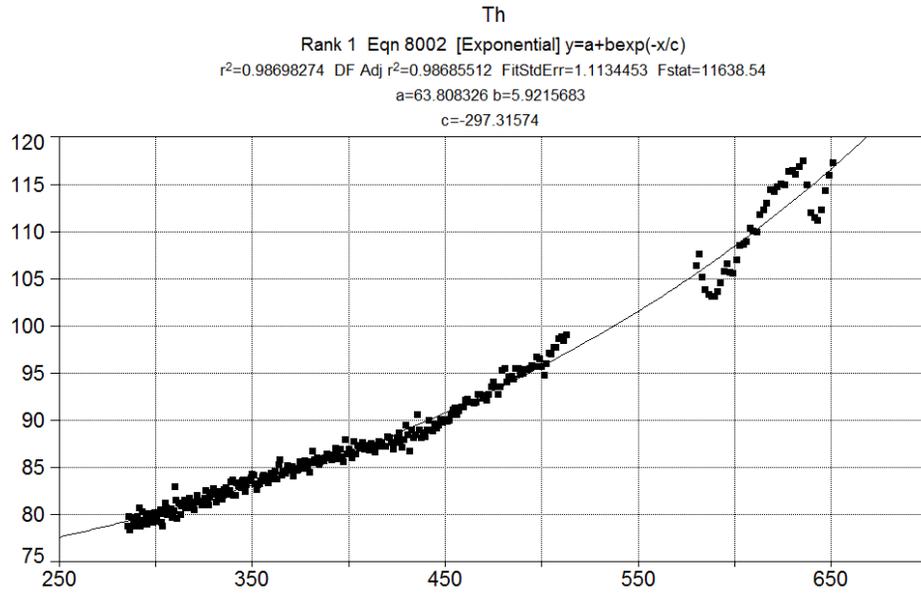


Figura 4.6 Grafico para el coeficiente global de transferencia de calor en función de la temperatura para la corrida 1

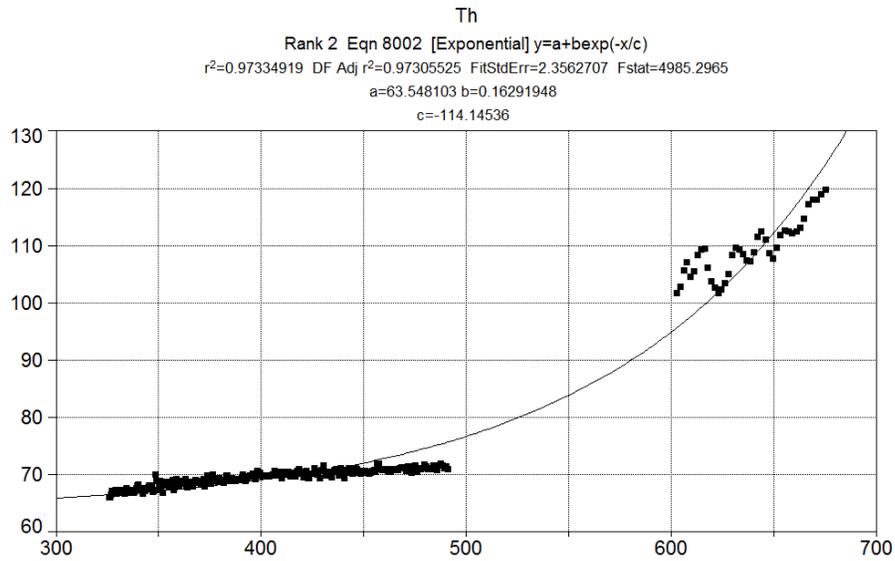


Figura 4.7 Grafico para el coeficiente global de transferencia de calor en función de la temperatura para la corrida 2

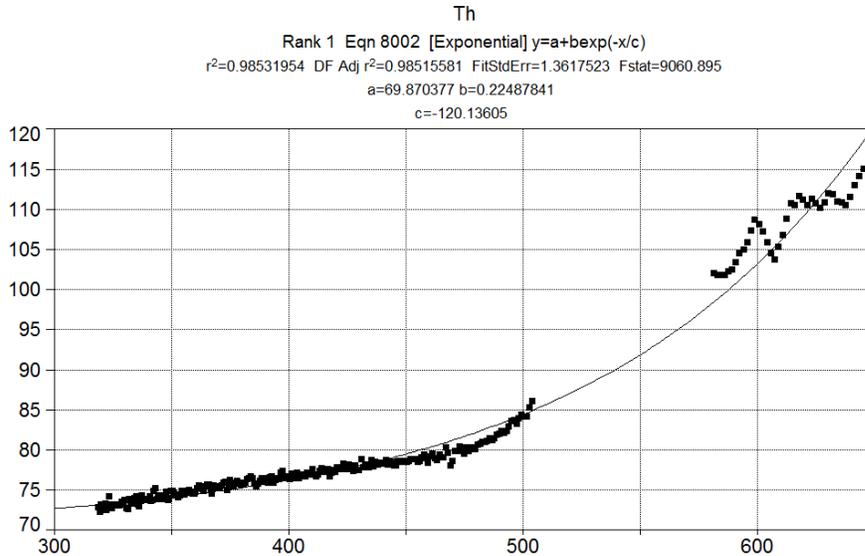


Figura 4.8 Grafico para el coeficiente global de transferencia de calor en función de la temperatura para la corrida 3

4.3 DETERMINACIÓN DE PARÁMETROS DE CRECIMIENTO DE GRANO.

A continuación se presenta el tratamiento numérico que se dio a los datos experimentales para poder obtener datos de la cinética de crecimiento de grano, que son los coeficientes preexponencial y exponencial de crecimiento de grano μ y n , que como se observa en la siguiente ecuación se emplean en el modelado del crecimiento de los núcleos con respecto al tiempo.

$$\frac{dR}{dt} = \mu \Delta T^n$$

4.3.1 MÉTODO DE DEGAND

Para la determinación de los parámetros preexponencial y exponencial de cinética de crecimiento de grano se emplearon dos métodos el método de Degand y el método de crecimiento libre.

Para usar el método de Degand fue necesaria la determinación del radio promedio, que se obtuvo de promediar los valores obtenidos para la ecuación 1.3 del capítulo 1, en el intervalo de temperatura que va desde el punto de inicio de solidificación hasta que se alcanza un valor para la fracción sólida 0.74.

En la siguiente tabla se muestran los valores obtenidos para cada una de las curvas.

Tabla 4.6 radio promedio de grano y coeficiente μ obtenido mediante el método de Degand.

curva	Radio promedio de grano(m)	de μ
1	0.00037934	4.027×10^{-7}
2	0.0003497	2.85×10^{-7}
3	0.00038805	3.39×10^{-7}

Como se mencionó, anteriormente en el método de Degand se asume que el coeficiente n tiene un valor de dos, por lo cual en este caso no fue necesario calcularlo. Podemos observar que los radios promedios de grano obtenidos para cada una de las curvas son bastante similares, ésto nos indica que no hubo variaciones significativas al momento de la solidificación de la aleación; sin embargo, los valores del coeficiente μ , aunque son del mismo orden de magnitud si presentan variaciones, como se mostró en las curvas de primera derivada, cada curva de enfriamiento presenta variaciones, debido a la cantidad de aleación que se fundió.

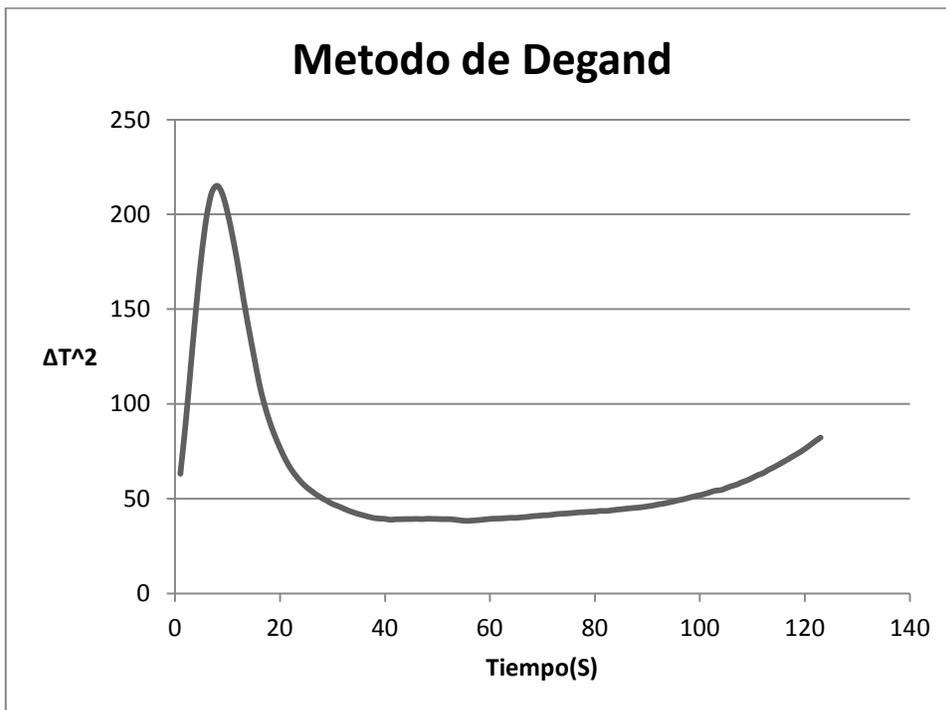


Figura 4.9 Representación Gráfica del método de Degand

4.3.2 MÉTODO DE CRECIMIENTO LIBRE

Para el empleo del método de crecimiento libre, el primer paso fue emplear una ecuación en la cual el radio de los granos estuviese en función de variables constantes conocidas y la fracción sólida:

$$R = \frac{3Fs^{\frac{1}{3}}}{4\pi N}$$

Una vez conocidos los valores de los radios en el intervalo de interés, se empleó el método de diferencias finitas divididas para obtener la derivada del radio con respecto del tiempo en cada uno de los puntos, y se gráfico con respecto al delta de temperatura (temperatura eutéctica menos temperaturas entre el intervalo de máximo sub enfriamiento y máxima recalcencia).

En los gráficos que se presentan a continuación se gráfico el logaritmo de la diferencia de temperatura contra el logaritmo de la derivada del radio con respecto del tiempo, para obtener una línea recta, donde n es la pendiente y $\ln\mu$ la ordenada al origen.

Mediante el empleo del software TCWIN se procesó cada una de las curvas, para mediante ajuste numérico encontrar el valor de la pendiente y la ordenada al origen de cada recta.

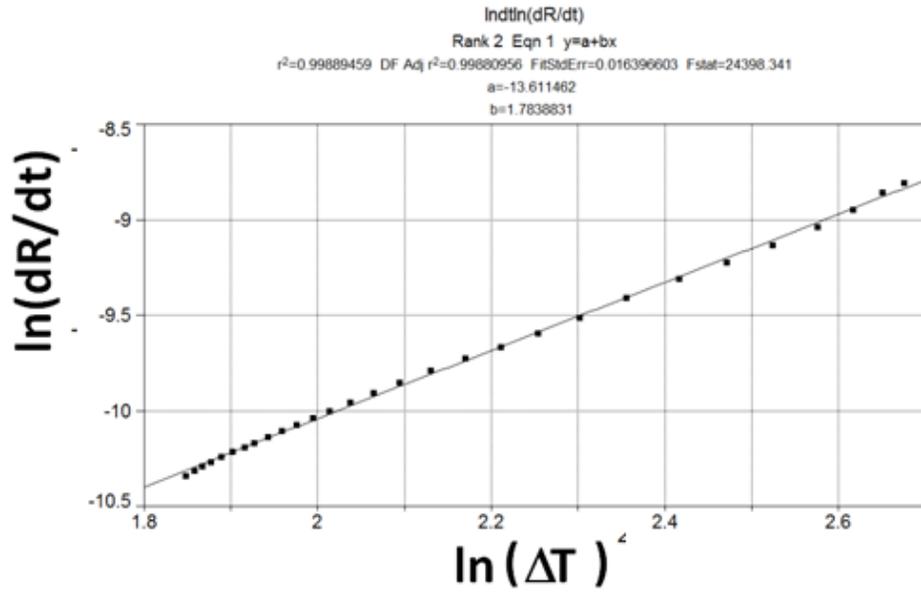


Gráfico 4.10 Método gráfico aplicado a la primera curva y el valor de la pendiente

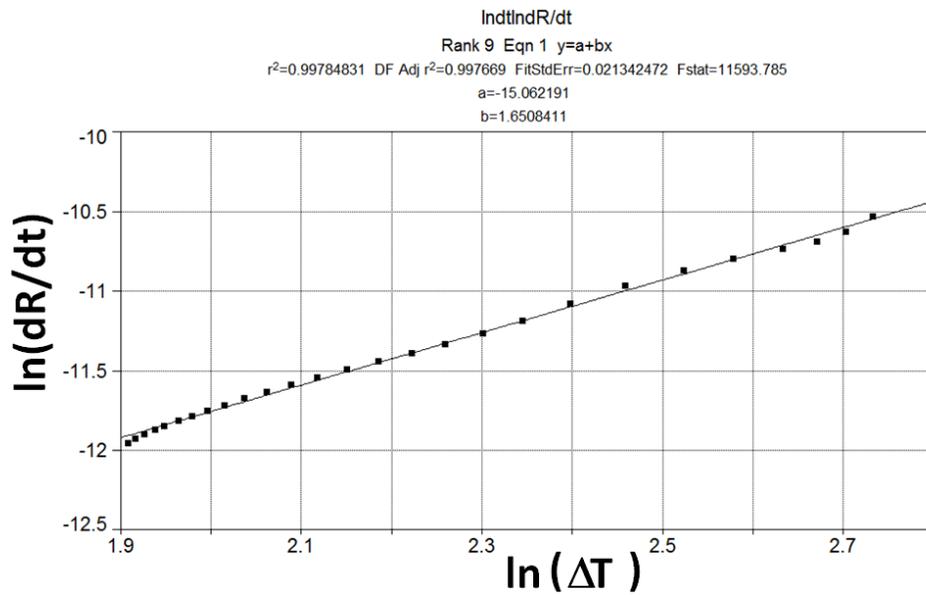


Gráfico 4.12 Método de crecimiento libre para la segunda corrida.

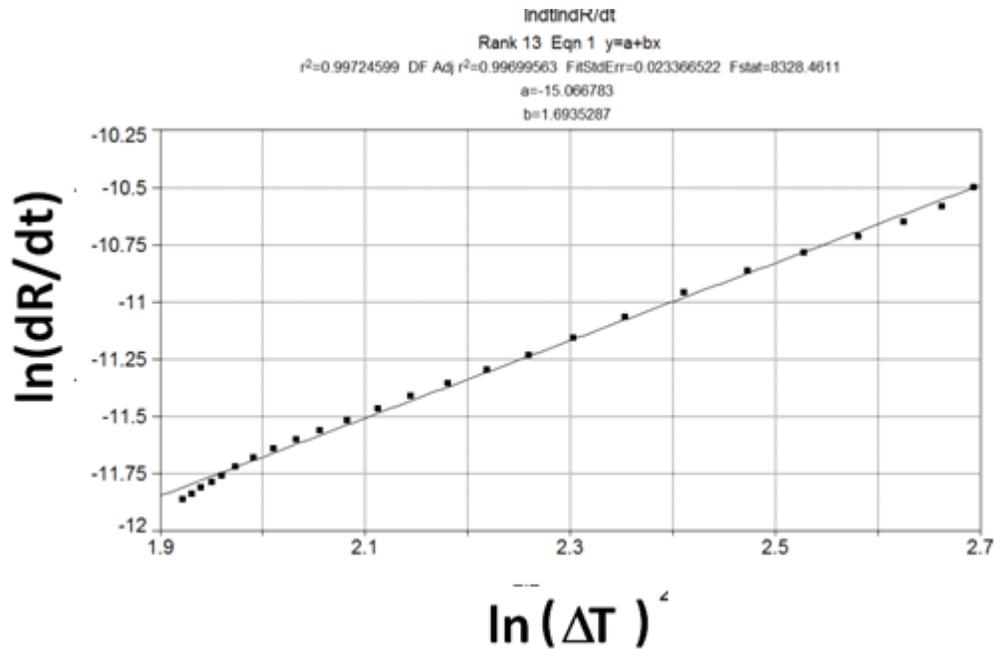


Gráfico 4.13 Método de crecimiento libre para la tercera corrida.

Tabla 4.7 Valores de μ y n obtenidos mediante el método de crecimiento libre los valores de n tienden a dos, y los valores de μ son del mismo orden de magnitud que los valores obtenidos empleando el método de Degand.

Curva	n	μ
1	1.783	7.57×10^{-7}
2	1.650	2.87×10^{-7}
3	1.693	2.86×10^{-7}

4.4 ANÁLISIS METALGRÁFICO.

A continuación se presentarán los resultados obtenidos de realizar el ataque termoquímico Poulton a las muestras, para poder obtener la densidad de núcleos por unidad de volumen experimental y compararla con la teórica.

Para poder revelar la macroestructura en la aleación aluminio-silicio modificada fue necesario realizar el ataque Poulton.

Previamente al ataque Poulton, las piezas fueron preparadas metalográficamente, mediante desbaste y pulido, hasta lograr una superficie especular.

El ataque Poulton es un procedimiento que revelará la macroestructura por medio de un calentamiento de la pieza a una temperatura que este aproximadamente

10°C por debajo de la temperatura eutéctica para precipitar el silicio a los límites de grano. En el caso de este experimento la temperatura seleccionada fue de 550°C

Una vez que la pieza alcanza la temperatura se deja dentro de la mufla durante un tiempo aproximado de 10 a 15 minutos para que alcance la temperatura del medio.

La temperatura dentro de la pieza fue monitoreada mediante el uso de un termopar tipo k.

Una vez que la temperatura de la pieza igualó la del sistema, la pieza fue retirada de la mufla y enfriada con agua, evitando que ésta tocara la cara superior, que fue preparada metalográficamente.

A la cara preparada metalográficamente se atacó con el reactivo de Poulton que consiste en una mezcla de ácido nítrico, clorhídrico y fluorhídrico. El reactivo se dejó en la superficie de la pieza por aproximadamente 30 segundos, posteriormente la pieza fue sumergida en agua para evitar que se sobreatacara.

Este procedimiento se repitió hasta que la macroestructura fuera revelada.

Posteriormente se fotografiaron las metalografías, para realizar la determinación del tamaño de grano y la densidad de núcleos por unidad de volumen.

También se incluirá el grado de modificación que se alcanzó en la aleación, en base a patrones de modificación.

A continuación se presentan las macroestructuras obtenidas para cada una de las tres muestras:

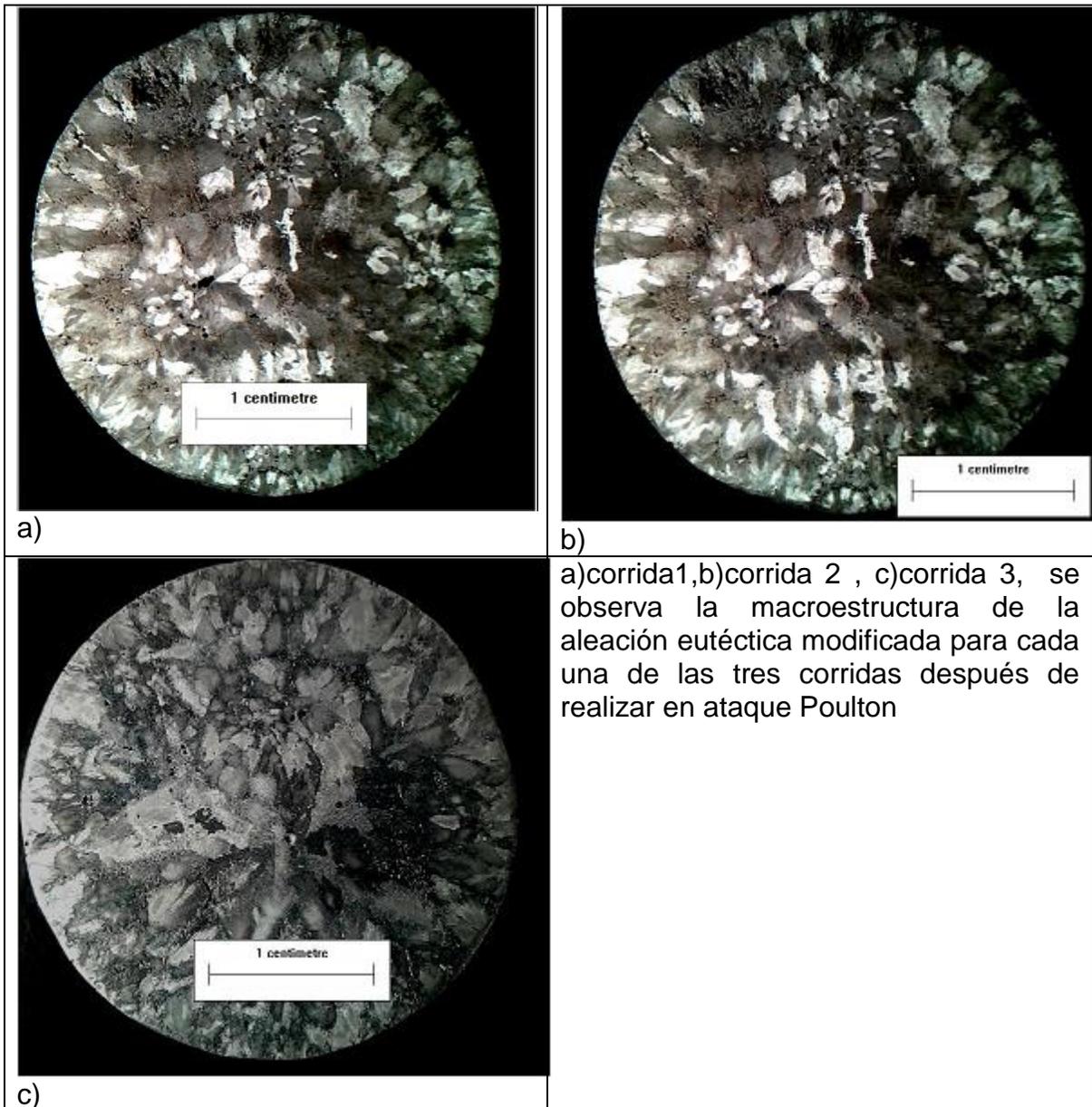


Figura 4.10 Macroestructuras de aleación eutéctica Al-Si modificado con 200 ppm de Sr

Para poder determinar la densidad de núcleos por unidad de volumen de la aleación modificada se empleó el software *image Pro plus*.

Usando el dato experimental de que el radio de cada una de las piezas tiene un valor de 1.5 cm. Se realizó la calibración para cada una de las imágenes seleccionadas, para ello se empleó una escala en centímetros.

Posteriormente, con la ayuda del mismo software, se trazó dentro del área de la muestra un cuadrado que tuviese un área de 1cm^2 . Dentro de esa área se contó el número de granos que había dentro de esta área, dicho conteo se realizó cinco veces en diferentes posiciones de la imagen obteniendo un valor promedio de $113\frac{\text{granos}}{\text{cm}^2}$, posteriormente se obtuvo la densidad de núcleos por m^2 mediante el siguiente procedimiento:

$$N_A = \left(\frac{113 \text{ granos}}{\text{cm}^2} \right) \left(\frac{100^2 \text{ cm}^2}{1 \text{ m}^2} \right) = 1130000$$

Una vez obtenido el valor de densidad de núcleos por unidad de área se empleó la siguiente ecuación estereográfica la cual permite conocer finalmente la densidad de núcleos promedio para las muestras experimentales.

$$N_{gv} = 0.87 N_A^{\frac{3}{2}} \quad (4.1)$$

Sustituyendo el valor de densidad de núcleos por unidad de área en la ecuación 5.1 se obtiene un valor de 1.045×10^9 .

4.5 VALIDACIÓN.

En este capítulo se presentan los resultados obtenidos de alimentar a un programa de cómputo con los datos obtenidos que resultaron de la aplicación del método de Newton y los coeficientes de crecimiento de grano obtenidos por los métodos de Degand y crecimiento libre.

4.5.1 DATOS ALIMENTADOS AL PROGRAMA PARA REALIZAR LA SIMULACIÓN DE CURVAS DE ENFRIAMIENTO.

Para realizar una simulación adecuada de la curva de enfriamiento del sistema aluminio-silicio modificado es necesario alimentar al programa de computo con los datos obtenidos para cada una de las curvas en el método de Newton, es fundamental tener la entalpía de solidificación obtenida para cada una de las curvas, la función que modela el coeficiente de transferencia de calor en función de la temperatura, así como los valores de los parámetros preexponencial y exponencial obtenidos tanto por el método de Degand como por el método de crecimiento libre.

Así mismo, es indispensable conocer las propiedades termofísicas de la aleación Al-Si, para esto se usaron las propiedades reportadas en la referencia (8) para obtener datos del calor específico usando la siguiente ecuación:

$$Cp = \frac{k}{\rho\alpha}$$

Para calcular el Cp del sistema se promediaran los datos obtenidos para el líquido y el sólido.

Tabla 4.9 propiedades termofísicas de la aleación líquida y sólida

	Líquido	Sólido
$\alpha\left(\frac{m^2}{s}\right)$	3.19×10^{-5}	5.5×10^{-5}
$k\left(\frac{w}{m^{\circ}C}\right)$	77.36	122.26
$\rho\left(\frac{kg}{m^3}\right)$	2450	2450
$Cp\left(\frac{J}{Kg}\right)$	989.827	907.309

Con los datos obtenidos de calor específico para la aleación líquida se emplea un promedio aritmético para obtener el valor que será empleado en el programa de cómputo $948.568 \frac{J}{Kg}$.

En la tabla siguiente se muestran los datos alimentados al programa usado, ALSI.BAS.

Tabla 4.10 datos de coeficiente global de transferencia de calor, entalpía de solidificación, y coeficientes preexponencial y exponencial de cinética de crecimiento de grano obtenidos en el presente trabajo.

Corrida 1	$Hf(\frac{J}{Kg})$	$h(T)\frac{J}{m^2s^{\circ}C}$	μ	N
Crecimiento libre	260211.2	63.808 $+ 5.921\exp(\frac{-T}{-297.315})$	4.02×10^{-7}	1.783
Degand	260211.2	63.808 $+ 5.921\exp(\frac{-T}{-297.315})$	7.57×10^{-7}	2

Corrida 2	HF	$h(T)$	μ	N
Crecimiento libre	2740996.23	63.548 $+ 0.162\exp(\frac{-T}{-114.145})$	2.87×10^{-7}	1.650
Degand	2740996.23	63.548 $+ 0.162\exp(\frac{-T}{-114.145})$	2.85×10^{-7}	2

Corrida 3	HF	$h(T)$	μ	N
Crecimiento libre	237643.751	69.870 $+ 0.224\exp(\frac{-T}{-120.136})$	2.86×10^{-7}	1.693
Degand		69.870 $+ 0.224\exp(\frac{-T}{-120.136})$	3.39×10^{-7}	2

Los datos representados en las tablas anteriores para cada una de las corridas fueron alimentados al programa ALSI.BAS, para así comprobar que el modelo matemático, es capaz de realizar predicciones sobre el sistema de estudio.

A continuación se presentan los resultados obtenidos en la simulación.

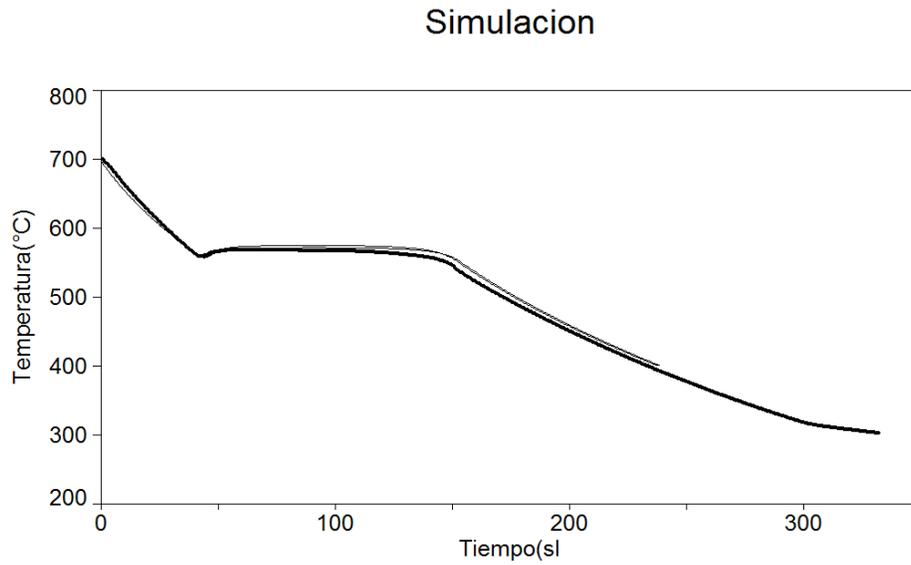


Figura 4.13 Comparación entre la curva obtenida experimentalmente y las simulación obtenida

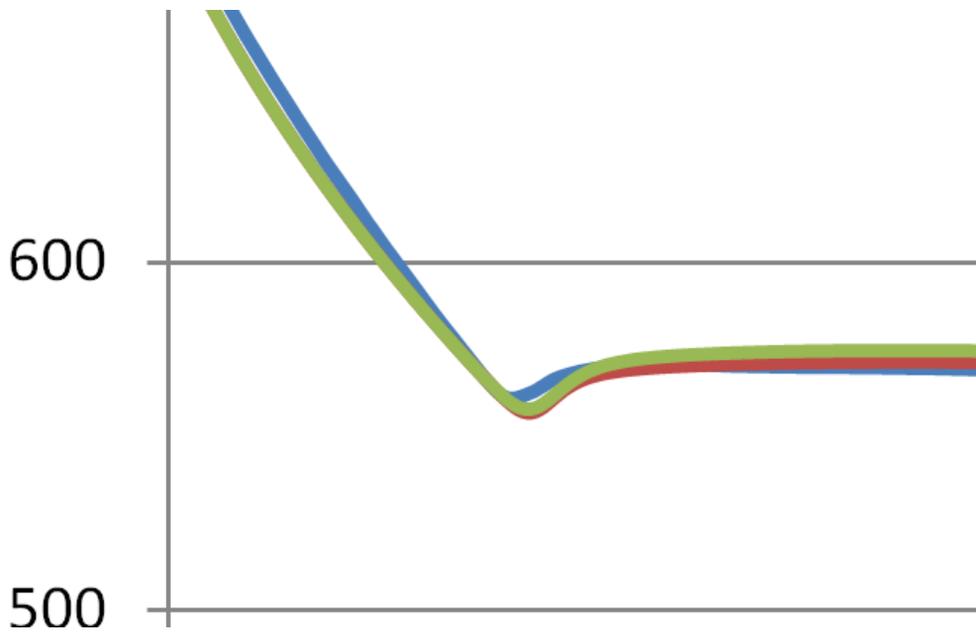


Figura 4.14 la curva azul corresponde a la curva obtenida experimentalmente, la verde al método de de Degand y la roja al crecimiento libre.

En la figura anterior se observa que tanto el método de crecimiento libre como el método de Degand arrojan resultados muy similares, ya que el coeficiente n empleado para el método de Degand tiene un valor 2 y los valores obtenidos

mediante el método de crecimiento libre están muy cercanos a dos, además los valores obtenidos para el coeficiente μ son del mismo orden de magnitud.

Se puede observar que la curva experimental y la de Degand tienen pendientes ligeramente diferentes, al llegar al máximo subenfriamiento, cuando inicia la meseta eutéctica, comienzan a diferir, sin embargo la más cercana a la curva experimental pasando el punto de máximo subenfriamiento, la curva que corresponde al método de crecimiento libre es la que mejor simula la curva experimental.

5.0 CONCLUSIONES.

-El método de análisis térmico de Newton así como los métodos de Degand y crecimiento libre fueron implementados y aplicados al enfriamiento y solidificación de una aleación eutéctica aluminio-silicio con 200ppm de estroncio obteniéndose la información requerida.

- el método de Newton permite obtener datos preciso sobre la determinación de el calor latente de solidificación, y la evolución de la fracción sólida de muestras experimentales.

-Mediante el procesamiento numérico a las curvas de enfriamiento experimentales es posible generar información numérica de la evolución del coeficiente global de transferencia de calor con respecto a la temperatura.

-Los métodos de Degand y crecimiento libre permiten la obtención de parámetros de crecimiento de grano, las variaciones entre ambos modelos son debidas a que el método de Degand asume un coeficiente exponencial con valor de 2, de acuerdo con la teoría clásica de crecimiento eutéctico y asume que el empalmamiento de los granos en crecimiento se alcanza a un valor de fracción sólida de 0.74, y el método de crecimiento libre emplea un método gráfico entre los puntos de temperatura de máximo subenfriamiento y máxima recalescencia.

-Mediante la elaboración de un modelo mecanístico se elaboró un programa de computo e implemento que permite simular la curva de enfriamiento de las probetas experimentales empleando para tal efecto un micro macro modelo de transferencia de calor y solidificación. En el programa se introdujeron los valores obtenidos en la experimentación a fin de validar la información generada.

-La buena concordancia cualitativa y cuantitativa entre las curvas de enfriamiento simuladas y experimentales sugieren que la metodología propuesta en este trabajo es útil y pertinente para generar información térmica y cinética requerida durante la simulación del enfriamiento y la solidificación de aleaciones eutécticas que solidifican equiaxialente.

REFERENCIAS:

- (1) H.Cruz, L. Lopez, B. Campillo and C. Gonzalez-Rivera."Use of Thermal Analysis for the prediction of the amount of microconstituents formed during solidification", Universidad Nacional Autónoma de México
- (2) G Upadhyay, D.M. Stefanescu, K. Lieu, D.P .Yeager "Computer-Aided Cooling curve Analysis: Principles and application in metal casting". Universidad de Alabama, Tuscaloosa
- (3) Angelica Alvarado Ramirez "Relación entre microestructura y propiedades mecánicas en piezas coladas de aluminio" Universidad Autónoma de Nuevo Leon. Junio de 1999.
- (4) N.Kanani, Berlin and G.R Abbaschian, "Modification of aluminium silicon alloys"Department of material science and engeneering, University of Florida, Gainesville
- (5) S.Surinach, M.D. Barro, S. Bordas, N. Clavaguerra, M.T. Clavaguerra-Mora "La calorimetría diferencial de barrido y su aplicación a la ciencia de materiales" Física de materiales, departamento de física, Universidad de Barcelona
- (6) E. Frasz, W. Kapturkiewicz, A.A. Burbielko and E. Guzikv"Application of Fouriers thermal analysis to determination of kinetics solidification of cast iron" University of Mining and Metallurgy Cracow, Poland. Advanced Material Research 1997
- (7) Norma ASTM E 122-00 "Standard practice for calculating sample size to estimate, with a specified tolerable error, the average for a characteristic of a lot or process"
- (8) C. Gonzalez Rivera, B.Campillo, M. Castro, M. Herrera, J. Juarez-Islas"On the local microstructural observed in sand cast Al-Si alloys" Departamento de ingeniería química metalúrgica, Universidad Nacional Autónoma de México, Septiembre de 1999

ANEXOS.

PROGRAMA DE CÓMPUTO ALSI. BAS

DECLARE SUB datos (h1, Tc, T0, Rom, Cpm, rp, dt1)

DECLARE SUB enfliq (h1, Tm, T0, Rom, Cpm, rp, dt1)

DECLARE SUB solidif (Tm, rg, dt1, fs1, h1, T0, Rom, Cpm, rp)

DECLARE SUB enfsolid (h1, Tm, T0, Rom, Cpm, rp, dt1)

datos h1, Tc, T0, Rom, Cpm, rp, dt1

Tm = Tc

archo\$ = "alsirev.txt"

OPEN archo\$ FOR OUTPUT AS #1

teut = 577

DO

h1 = 70.21 + 2.38 * EXP(-Tm / -209.157)

enfliq h1, Tm, T0, Rom, Cpm, rp, dt1

tt1 = tt1 + dt1

WRITE #1, tt1, Tm

LOOP UNTIL Tm < teut

CLOSE #1

OPEN archo\$ FOR APPEND AS #1

DO

```

h1 = 70.21 + 2.38 * EXP(-Tm / -209.157)
solidif Tm, rg, dt1, fs1, h1, T0, Rom, Cpm, rp
tt1 = tt1 + dt1
WRITE #1, tt1, Tm
LOOP UNTIL fs1 > .997
CLOSE #1
OPEN arco$ FOR APPEND AS #1
DO
h1 = 70.21 + 2.38 * EXP(-Tm / -209.157)
enfsolid h1, Tm, T0, Rom, Cpm, rp, dt1
tt1 = tt1 + dt1
WRITE #1, tt1, Tm
LOOP UNTIL Tm < 400
CLOSE #1
END

SUB datos (h1, Tc, T0, Rom, Cpm, rp, dt1)
h1 = 600
Tc = 700' temperatura de colada
T0 = 25' temperatura ambiente
Rom = 2500'densidad del metal
Cpm = 1000'capacidad calorifica del metal
rp = .015' radio de la pieza en (m)
dt1 = .5'paso de tiempo para el calculo
END SUB

```

```

SUB enfliq (h1, Tm, T0, Rom, Cpm, rp, dt1)
dTdt = -2 * h1 * (Tm - T0) / (Rom * Cpm * rp)
Tm = Tm + dTdt * dt1
END SUB

```

```

SUB enfsolid (h1, Tm, T0, Rom, Cpm, rp, dt1)
dTdt = -2 * h1 * (Tm - T0) / (Rom * Cpm * rp)
Tm = Tm + dTdt * dt1

END SUB

```

```

SUB solidif (Tm, rg, dt1, fs1, h1, T0, Rom, Cpm, rp)
Hf = 260211.8
Ngv = 1E+07
dteut = 577 - Tm
drgdt = .000005 * (dteut ^ 2)
rg = rg + drgdt * dt1
Xeut = (4 / 3) * 3.1416 * Ngv * (rg ^ 3)
SELECT CASE Xeut
CASE IS < .000001
fs2 = Xeut
CASE ELSE
fs2 = 1 - EXP(-Xeut)
END SELECT

```

$$dfsdt = (fs2 - fs1) / dt1$$

$$fs1 = fs2$$

$$dTdt = -2 * h1 * (Tm - T0) / (Rom * Cpm * rp) + (Hf / Cpm) * dfsdt$$

$$Tm = Tm + dTdt * dt1$$

END SUB