



UNIVERSIDAD NACIONAL AUTÓNOMA DE MÉXICO

FACULTAD DE QUÍMICA

Determinación del Coeficiente Global de Transferencia de Calor Durante el Enfriamiento y Solidificación de Metales de Pureza Comercial en Moldes Metálicos y su Validación Mediante Modelado Mecánico.

TESIS

QUE PARA OBTENER EL TÍTULO DE
INGENIERO QUÍMICO METALÚRGICO

PRESENTA

JHOAN ADÁN GUZMÁN GONZÁLEZ



MÉXICO, D.F.

2015



Universidad Nacional
Autónoma de México

Dirección General de Bibliotecas de la UNAM

Biblioteca Central



UNAM – Dirección General de Bibliotecas
Tesis Digitales
Restricciones de uso

DERECHOS RESERVADOS ©
PROHIBIDA SU REPRODUCCIÓN TOTAL O PARCIAL

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

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

JURADO ASIGNADO:

PRESIDENTE: **Profesor:** Eusebio Cándido Atlatenco Tlapanco

VOCAL: **Profesor:** José Alejandro García Hinojosa

SECRETARIO: **Profesor:** Carlos González Rivera

1er. SUPLENTE: **Profesor:** Marco Aurelio Ramírez Argaez

2° SUPLENTE: **Profesor:** Agustín Gerardo Ruiz Tamayo

SITIO DONDE SE DESARROLLÓ EL TEMA:

DEPARTAMENTO DE INGENIERÍA QUÍMICA METALÚRGICA, FACULTAD DE QUÍMICA, UNAM.

ASESOR DEL TEMA:

Dr. Carlos González Rivera

SUPERVISOR TÉCNICO:

M. en M. Agustín Gerardo Ruiz Tamayo

SUSTENTANTE:

Jhoan Adán Guzmán González

Resumen

Industrialmente uno de los procesos más importantes es la fundición, proceso en el cual da lugar la solidificación, fenómeno físico-químico en el cual un líquido cambia de estado a sólido debido a la disminución de la temperatura. Como en todo proceso, existe una necesidad de optimización, para lo cual se recurre a modelos matemáticos que simulen el proceso de principio a fin. Estos modelos matemáticos requieren ser construidos teniendo en cuenta una adecuada representación de las condiciones de enfriamiento que presentaran las muestras experimentales que serán empleadas para la validación. En particular se requiere contar con valores adecuados de las propiedades termo-físicas del metal que se enfría y solidifica así como del coeficiente de transferencia de calor actuante durante el enfriamiento de la muestra experimental el cual deberá de ser obtenido, en la mayoría de los casos, experimentalmente.

En este trabajo se lleva a cabo una metodología experimental con el objetivo de obtener el coeficiente de transferencia de calor global en función de la temperatura de una serie de metales puros durante su enfriamiento y solidificación en moldes metálicos. La determinación de estos coeficientes se lleva a cabo mediante el tratamiento numérico de curvas de enfriamiento experimentales, el cual está basado en un balance de energía del sistema asumiendo que el proceso de enfriamiento y solidificación consta de tres etapas que son: **I. Enfriamiento del líquido; II. Solidificación y III. Enfriamiento del Sólido.**

Con el fin de validar los coeficientes de transferencia de calor se implementó un modelo mecanístico computacional para simular la curva de enfriamiento el cual hace uso de dichos coeficientes, encontrando así una buena concordancia entre las curvas simuladas y las curvas experimentales estudiadas.

Índice

Capítulo 1. Introducción	1
1.1 Proceso de Fundición.....	1
1.2 Problemática.....	3
1.3 Justificación	3
1.4 Objetivos.....	4
Capítulo 2. Antecedentes	5
2.1 Importancia de la Solidificación	5
2.2 Solidificación de Metales Puros	6
2.3 Nucleación.....	7
2.3.1 Nucleación Homogénea	9
2.3.2 Nucleación Heterogénea.....	9
2.4 Importancia del Modelado de la Solidificación	11
2.5 Propiedades Termodinámicas a Altas Temperaturas.....	11
2.6 Coeficiente de Transferencia de Calor.....	12
2.6.1 Coeficiente de Transferencia de Calor Global.....	13
Capítulo 3. Modelo Matemático y Resolución Numérica	14
3.1 Planteamiento del Sistema.....	14
3.2 Transferencia de Calor durante la Solidificación.....	15
3.2.1 Etapa I. Enfriamiento del Líquido	15
3.2.2 Etapa II. Solidificación.....	17
3.2.2.1 Método de Recuperación de Temperatura.....	17
3.2.2.2 Método del Calor Específico Equivalente.....	17
3.2.3 Etapa III. Enfriamiento del Sólido.....	20
3.3 Cálculo Numérico del Coeficiente de Transferencia de Calor Global.....	20
3.4 Validación del Coeficiente mediante un Modelo Mecánico	22
3.5 Algoritmo Computacional.....	23
Capítulo 4. Procedimiento Experimental	24
4.1 Diseño Experimental	24
4.2 Metodología de Trabajo.....	26

Capítulo 5. Resultados y Discusión	27
5.1 Curvas de Enfriamiento	27
5.2 Análisis de Datos	30
5.2.1 Criterio de la Primera Derivada	30
5.2.2 Aplicación del Algoritmo Computacional.....	31
5.2.3 Ajuste de Datos.....	32
5.2.4 Tabla de Coeficientes de Transferencia de Calor Globales	33
5.2.5 Validación de los Coeficientes Obtenidos.....	34
5.3 Discusión de Resultados	40
Capítulo 6. Conclusiones	44
Bibliografía.....	45

Índice de Figuras

1.1	Diferentes objetos obtenidos por el proceso de Fundición	2
2.1	Curva de enfriamiento de un metal puro con un posible subenfriamiento	6
2.2	Representación esquemática de la formación de una partícula sólida en el seno del fluido y gráfico de cambio total de energía libre asociado a la partícula sólida en el líquido	8
2.3	Representación esquemática del mecanismo de nucleación heterogénea	10
3.1	Representación esquemática del sistema Crisol-Metal	14
3.2	Etapas consideradas durante el enfriamiento de un metal puro	15
3.3	Resistencias térmicas consideradas en la etapa I	16
3.4	Diagrama eutéctico idealizado	18
3.5	Resistencias térmicas consideradas en la etapa III	20
3.6	Algoritmo de cálculo computacional del coeficiente U	21
3.7	Algoritmo de Cálculo para el modelo de la Curva de Enfriamiento	23
4.1	Representación esquemática del Sistema Experimental	24
4.2	Representación esquemática con dimensiones del Sistema Experimental	25
4.3	Representación esquemática del Sistema Experimental con el sistema de enfriamiento	25
5.1	Curvas de enfriamiento del Aluminio	27
5.2	Curvas de enfriamiento del Cadmio	28
5.3	Curvas de enfriamiento del Plomo	28
5.4	Curvas de enfriamiento del Zinc	28
5.5	Curvas de enfriamiento del Estaño	28
5.6	Derivada numérica de la curva de enfriamiento con y sin el filtro de Savitzky-Golay	30
5.7	Coeficiente U en la etapa I de la curva de enfriamiento	31
5.8	Coeficiente U en la etapa II de la curva de enfriamiento	32
5.9	Coeficiente U con un ajuste estadístico en la etapa I de la curva de enfriamiento	32
5.10	Coeficiente U con un ajuste estadístico en la etapa II de la curva de enfriamiento	33
5.11	Comparación de las curvas de enfriamiento simuladas con la experimental para el Aluminio en condiciones de convección natural	34
5.12	Comparación de las curvas de enfriamiento simuladas con la curva experimental para el Aluminio en condiciones de convección forzada	35
5.13	Comparación de las curvas de enfriamiento simuladas con la curva experimental para el Cadmio en condiciones de convección natural	35
5.14	Comparación de las curvas de enfriamiento simuladas con la curva experimental para el Cadmio en condiciones de convección forzada	36
5.15	Comparación de las curvas de enfriamiento simuladas con la curva experimental para el Plomo en condiciones de convección natural	36
5.16	Comparación de las curvas de enfriamiento simuladas con la curva experimental para el Plomo en condiciones de convección forzada	37
5.17	Comparación de las curvas de enfriamiento simuladas con la curva experimental para el Zinc en condiciones de convección natural	37

5.18	Comparación de las curvas de enfriamiento simuladas con la curva experimental para el Zinc en condiciones de convección forzada	38
5.19	Comparación de las curvas de enfriamiento simuladas con la curva experimental para el Estaño en condiciones de convección natural y crisol de pared delgada	38
5.20	Comparación de las curvas de enfriamiento simuladas con la curva experimental para el Estaño en condiciones de convección natural y crisol de pared gruesa	39
5.21	Comparación de las curvas de enfriamiento simuladas con la curva experimental para el Estaño en condiciones de convección forzada	39
5.22	Coefficiente U en función de la temperatura del Aluminio	40
5.23	Coefficiente U en función de la temperatura del Cadmio	41
5.24	Coefficiente U en función de la temperatura del Plomo	41
5.25	Coefficiente U en función de la temperatura del Zinc	42
5.26	Coefficiente U en función de la temperatura del Estaño	42

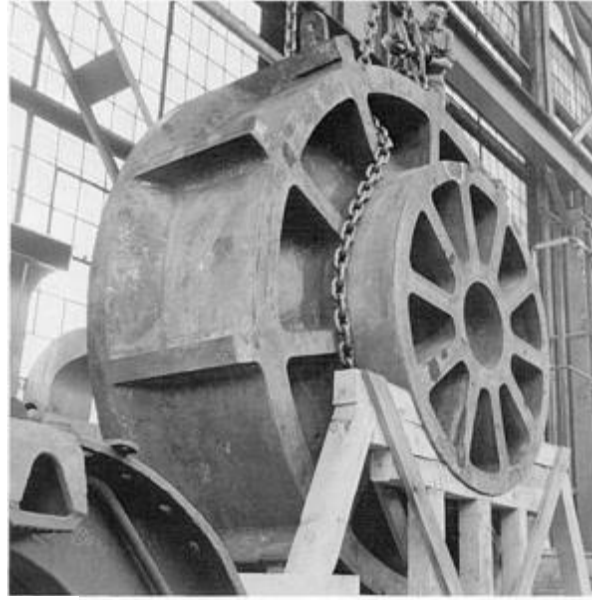
Capítulo 1

Introducción

1.1 Proceso de Fundición

La capacidad de usar calor para fundir y producir metales y aleaciones como el cobre, el bronce y el acero es considerada como un importante paso en el desarrollo de la humanidad. El uso del fuego para reducir minerales y obtener metales y aleaciones llevo a la producción de herramientas útiles y otros productos lo que potenció el desarrollo de la humanidad. Actualmente la fundición sigue siendo considerada uno de los procesos de manufactura más importantes. Asociada a este proceso se encuentra la solidificación, este fenómeno tiene lugar cuando los materiales líquidos solidifican al pasar por debajo de su respectiva temperatura de fusión, de igual forma que cuando el agua se congela para formar hielo.

La solidificación es una de las etapas más importantes en el procesamiento de un metal o aleación, ya que de esta depende en gran medida la calidad y propiedades del metal en cuestión, lo que determina su utilidad. La gran mayoría de los materiales en un determinado punto de su procesamiento se encuentran en estado líquido. Este proceso es usado principalmente para obtener piezas con una determinada forma, la cual está definida por el molde en el que solidifique el metal. Este proceso además permite la producción de un sinfín de piezas con geometrías que van de lo simple a lo complejo, de dimensiones del orden de cm^3 hasta m^3 , de un peso que va de unos cuantos gramos a varias toneladas; por esto y otras razones la fundición es y seguirá siendo uno de los procesos más importantes a nivel industrial. Esta versatilidad permite que existan diferentes tipos de fundición económicamente viables que permiten fabricar desde una sola pieza prototipo hasta miles de piezas en serie¹.



(a)



(b)

Figura 1.1 Versatilidad del proceso de fundición, (a) dado de 61 ton usado para producir cabezas de presión de reactores nucleares y (b) una variedad de piezas pequeñas que pesan unos cuantos cientos de gramos.

Millones de toneladas de acero, aleaciones de aluminio, cobre y zinc son producidas a través del proceso de fundición². Industrialmente este proceso es utilizado tanto como para obtener componentes específicos con geometrías complejas como para obtener piezas de geometría simple como lingotes es un proceso primario. La solidificación también tiene una extensa aplicación en procesos de unión de materiales metálicos como los procesos de soldadura. Por esto, la solidificación es una tecnología extremadamente importante ya que es usada para controlar las propiedades de los productos de fundición así como una herramienta para la manufactura de materiales de ingeniería avanzados.

Los productos de fundición son comúnmente usados en automóviles, camiones, aviones, trenes, equipo de construcción y minería, pozos petroleros, domésticos, tubos, juguetes, naves aeroespaciales, turbinas de vientos, plantas nucleares, tanques, bombas y más³. Esta gran diversidad en los productos finales de los procesos de fundición es un resultado directo de las muchas ventajas funcionales y beneficios económicos que la fundición ofrece comparada con otros procesos de manufactura de piezas metálicas.

1.2 Problemática

El proceso de fundición requiere de un control de la solidificación ya que de esta depende la microestructura formada, la cual a su vez determina las propiedades de la pieza y por ende la calidad del producto final.

Un correcto control de la solidificación requiere de la completa comprensión de la relación entre las variables de proceso y la físico-química detrás de la solidificación. La predicción de la evolución térmica es clave para predecir la microestructura obtenida en cada pieza, lo cual permite la optimización de las propiedades de los productos finales⁴.

Es aquí donde entra el modelado matemático, el cual permite predecir el comportamiento de un sistema en función de los parámetros que afectan al mismo. La solidificación, es un fenómeno que puede tener varios enfoques y está íntimamente relacionado con la energía del sistema, así como las propiedades termo-físicas de este. La modelación matemática de este fenómeno requiere del conocimiento de ciertos parámetros termo-físicos, propios del sistema, uno de los más importantes y a su vez más difíciles de obtener es el coeficiente global de transferencia de calor, el cual considera la contribución de la conducción, convección y radiación. Este parámetro es representativo de cada sistema experimental por lo que, aunque existe una enorme cantidad de datos en la literatura sobre valores típicamente presentes en condiciones específicas de enfriamiento, no es posible tomar uno de estos valores y aplicarlo a un determinado modelo a menos que se reproduzcan exactamente las condiciones en las que fue obtenido el coeficiente de transferencia de calor reportado.⁵

1.3 Justificación

En base a la Problemática, existe una necesidad para desarrollar métodos experimentales que permitan obtener coeficientes globales de transferencia de calor de un sistema en función de la temperatura para su aplicación en la modelación matemática del enfriamiento y solidificación de sistemas experimentales específicos.

Una de las técnicas más simples y más eficientes consiste en el registro de la temperatura durante el enfriamiento del metal hasta su completa solidificación. Esta técnica permite predecir la microestructura obtenida y, mediante su manipulación numérica, permite la estimación del coeficiente de transferencia de calor global como se mostrara posteriormente.

Sin embargo, no basta con la obtención de los coeficientes de transferencia de calor, también es necesaria su validación, la cual es posible mediante la simulación de las curvas de enfriamiento.

La comparación entre las curvas de enfriamiento experimentales y las simuladas dará validez a la aplicabilidad del método propuesto para determinar los coeficientes de transferencia de calor.

1.4 Objetivos

- Determinar el coeficiente de transferencia de calor global en función de la temperatura durante la solidificación en un molde metálico de acero inoxidable, aislado térmicamente en su tapa y en su base y que contiene inicialmente líquidos los siguientes metales de pureza comercial: Aluminio, Cadmio, Plomo, Zinc y Estaño.
- Determinar el efecto que tiene la velocidad de enfriamiento en el coeficiente de transferencia de calor global.
- Determinar el efecto que tiene el espesor de pared del crisol en el coeficiente de transferencia de calor global.
- Validar los coeficientes de transferencia de calor mediante modelado mecanístico.

Capítulo 2

Antecedentes

2.1 Importancia de la Solidificación

Aunque tal vez no sea tan apreciado, la solidificación es un fenómeno que se encuentra presente en alguna etapa de manufactura de casi todos los objetos hechos por el hombre.

En el caso de los metales, la fusión está acompañada de una drástica disminución en la viscosidad. Así, en lugar de gastar energía contra el elevado esfuerzo de cedencia de un metal sólido en un proceso de forja o similares, solo es necesario lidiar con el esfuerzo de corte de un líquido, el cual es prácticamente igual a cero.

La influencia de la solidificación es más evidente cuando la fundición es la última etapa dado que las propiedades resultantes dependen marcadamente de las variables de solidificación. Su influencia puede observarse incluso después de un mecanizado o conformado mecánico dado que la estructura de solidificación y sus defectos asociados son difíciles de eliminar una vez que se han creado. Los defectos de solidificación tienden a persistir incluso después de varias operaciones subsecuentes por lo que un buen control de la solidificación es de vital importancia para un producto de buena calidad⁶.

Algunos procesos donde la solidificación es una de las etapas más importantes son: procesos de fundición, procesos de soldadura, procesos de solidificación ultra-rápida, solidificación direccional, crecimiento de monocristales, etc.

Adicionalmente, la cristalización de ciertas sustancias puras es de gran importancia. Por ejemplo, la preparación de cristales de silicio grado semiconductor es un paso esencial en la física del estado sólido moderna y es de gran importancia en nuevas tecnologías. La producción de circuitos integrados requiere de la preparación de grandes monocristales de alta perfección, conteniendo una cantidad controlada uniformemente distribuida de dopantes. Los requerimientos de la física de semiconductores han influenciado enormemente la práctica y teoría de la solidificación. Por lo que, durante los pasados 40 años la solidificación ha evolucionado de ser un área tecnológica empírica a ser una ciencia.⁷

2.2 Solidificación de Metales Puros

Las condiciones de solidificación determinan las estructura, homogeneidad y solidez de productos colados; los principios científicos gobernantes en este proceso tienen un sinfín de aplicaciones. Ejemplos de estas aplicaciones se encuentran en todos los procesos de soldadura, que muchos consideran una '*mini fusión*', y el proceso de fusión de óxidos refractarios.

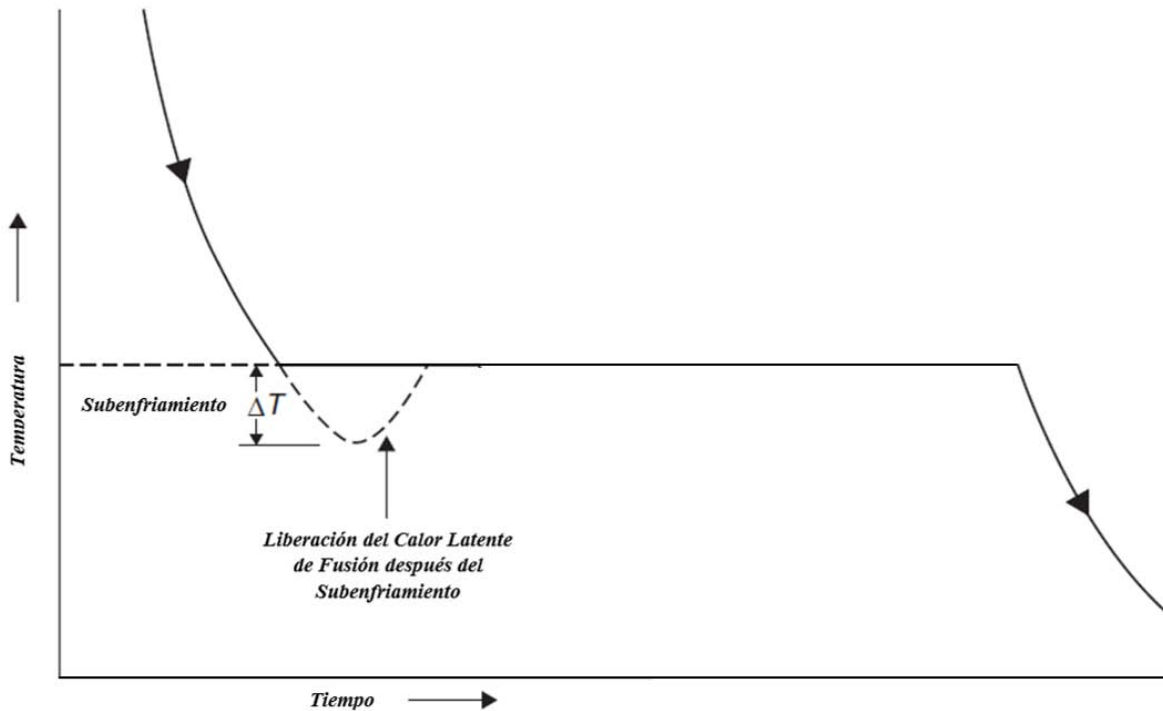


Figura 2.1 Curva de enfriamiento de un metal puro con un posible subenfriamiento.

En la figura 2.1 se observa una curva de enfriamiento de un metal puro, en la cual se identifica un punto importante que corresponde a la Temperatura de fusión del metal, la cual es dependiente de la presión y el metal específico. Su valor es proporcional a la fuerza de unión entre los átomos del metal. La transición de un líquido altamente desordenado a un sólido ordenado se alcanza mediante la disminución de la energía interna del metal y la liberación de energía térmica (Entalpia de Fusión). Este ordenamiento tiene un efecto inmediato en otras propiedades sensibles a la estructura del metal; por ejemplo, el volumen comúnmente disminuye entre 1-6%, la conductividad eléctrica se incrementa y la difusividad cae.

En el caso general de la solidificación de un metal puro, este es un proceso de nucleación y crecimiento en donde la nucleación se realiza heterogéneamente sobre sustratos preexistentes⁸. Los metales puros, en función de su pureza y de las condiciones de extracción de calor pueden nuclear

heterogéneamente en la interface metal molde y de ahí crecer direccionalmente los granos más favorecidos por la dirección de la extracción de calor hacia el interior de la pieza, solidificando de manera columnar o bien se se forman diminutos núcleos cristalinos aleatoriamente. Después de esta nucleación heterogénea, una continua extracción de energía térmica del sistema causa que estas pequeñas regiones cristalinas crezcan independientemente a expensas del líquido alrededor, crecimiento que se conoce como equiaxiado.

Industrialmente, usualmente se introducen partículas insolubles (que pueden ser de material refractario o aleaciones) en el líquido para que actúen como centros de nucleación heterogénea. La aparición de un subenfriamiento con este método es mucho menos probable, de hecho, para obtener un subenfriamiento de considerable magnitud se necesita un metal de alta pureza y un volumen muy pequeño.

El crecimiento de los cristales poco a poco consume el líquido hasta que chocan entre ellos y forman una estructura con granos equiaxiales. En la nucleación heterogénea con el uso de refinadores de grano, en la cual se forma una mayor cantidad de núcleos heterogéneos, se obtiene una micro estructura final con un tamaño de grano mucho menor que sin el empleo de estos refinadores.

Los límites de grano resultantes tienen unos cuantos átomos de ancho. El ángulo de orientación entre granos adyacentes es usualmente mayor a 10-15°. Debido a este desajuste, estos límites de grano de alto-ángulo contienen una mayor energía que el resto de los granos, por lo que, al refundir, tienden a fundirse primero⁹.

2.3 Nucleación

La primera etapa de la solidificación de un material es la nucleación, esta consiste en la formación de nanocristales en el material líquido. Dicho de otra forma, la nucleación se refiere a la etapa inicial de formación de una fase a partir de otra.

Se espera que un material solidifique cuando el líquido se enfríe por debajo de la temperatura de solidificación del material, dado que la energía asociada con la estructura cristalina del sólido es menor que la energía del líquido. Esta diferencia de energía entre el líquido y el sólido es la energía libre por unidad de volumen ΔG_v y es la fuerza motriz para la solidificación. Sin embargo, cuando el sólido se forma, se crea una interfaz sólido-líquido con una energía σ_{sl} asociada. Asumiendo que los núcleos adoptan una geometría esférica el cambio total de energía ΔG está dado como

$$\Delta G = \frac{4}{3}\pi r^3 \Delta G_v + 4\pi r^2 \sigma_{sl} \quad (1)$$

Donde $\frac{4}{3} \pi r^3$ y $4\pi r^2$ son el volumen y area de una esfera de radio r respectivamente, σ_{sl} es la energia libre superficial de la interfaz solido-liquido y ΔG_v es el cambio de energia libre por unidad de volumen, el cual es negativo dado que la transformacion de fase es termodinamicamente factible¹⁰. Un *embrion* es una pequena partícula solida que se forma en el seno del fluido como un grupo de atomos.

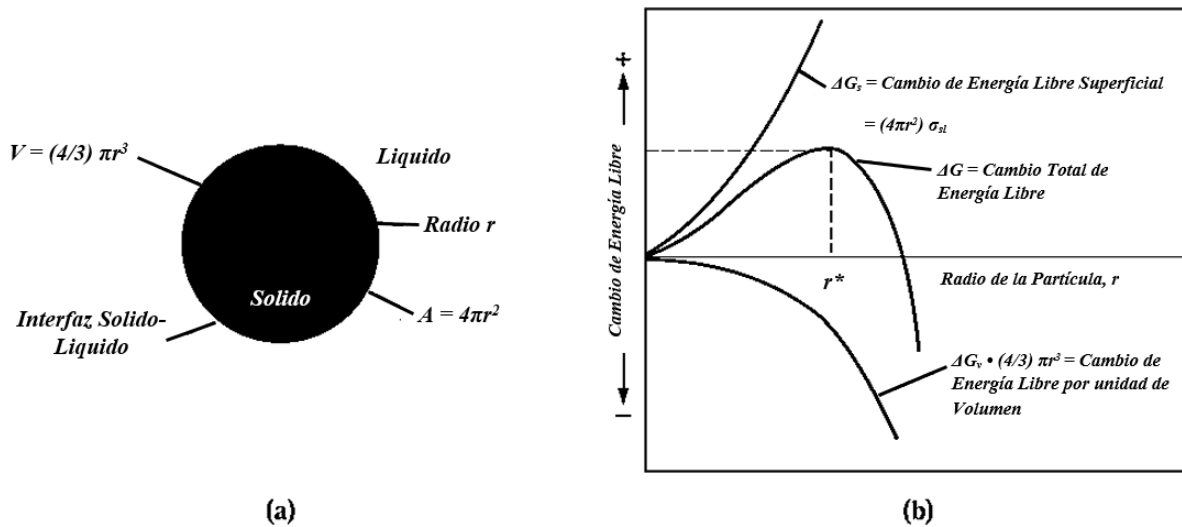


Figura 2.2 (a) formacion de una partícula solida en el seno del fluido, (b) cambio total de energia libre asociado a la partícula solida en el liquido; la partícula es considerada un *embrion* si su radio es menor al radio critico r^* , por encima de este se considera *nucleo*.

A la temperatura de equilibrio entre las fases sólida y líquida (temperatura de solidificación), la energía libre de ambas fases son iguales ($\Delta G_v = 0$), de tal forma que el cambio de energía libre total (ΔG) es positivo. Cuando la partícula solida tiene un radio menor al radio critico (r^*), un mayor crecimiento causa un incremento en la energía libre. El radio critico r^* es el radio mínimo que un cristal formado en el fluido debe de tener para que sea estable y pueda seguir creciendo.

La formación de embriones es un proceso estadístico. Muchos embriones se forman y se re disuelven. Si por casualidad, se forma un embrión con un radio mayor a r^* , un mayor crecimiento causa un decremento en la energía libre total. El nuevo solido es estable y un posterior crecimiento es viable.

A la temperatura de solidificación, la probabilidad de formación de un núcleo estable es extremadamente pequeña. Por consiguiente, la solidificación no comienza exactamente a esta temperatura. Si la temperatura continua descendiendo por debajo de la temperatura de fusión, la fase líquida que debió de haberse transformado en solido comienza a ser cada vez más inestable termodinamicamente. Dado que la temperatura del líquido está por debajo de la temperatura de fusión, se considera que el líquido se encuentra sub-enfriado.

Este subenfriamiento está dado como la diferencia entre la temperatura de fusión del material y la temperatura actual del líquido (ΔT).

Conforme aumenta la magnitud del subenfriamiento, la fuerza motriz termodinámica para la formación de una fase sólida a partir del líquido supera la resistencia para crear una interfaz sólido-líquido.

Este fenómeno también se puede ver en muchos otros tipos de transformaciones de fase. Cuando una fase sólida (α) se transforma en otra fase sólida (β), este sistema se tiene que enfriar a una temperatura menor a la temperatura de equilibrio de las fases α y β .

2.3.1 Nucleación Homogénea

Para plantear de una manera más simple desde el punto de vista matemático el costo energético asociado a la nucleación heterogénea, que es el proceso que se presenta durante la solidificación de metales puros y aleaciones metálicas en procesos convencionales de solidificación a nivel industrial se analiza de manera previa el caso hipotético de nucleación homogénea. Este caso hipotético se describe a continuación.

Al enfriarse un líquido por debajo de la temperatura de solidificación existen dos factores combinados que favorecen la nucleación. Primero, dado que los átomos pierden energía térmica, incrementa la probabilidad de formar grupos de átomos que formen embriones más grandes. Segundo, el incremento en la energía libre por unidad de volumen entre el líquido y el sólido disminuye el radio crítico (r^*) del núcleo. La nucleación homogénea ocurre cuando el subenfriamiento es lo suficientemente grande como para permitir la formación de núcleos estables. El radio crítico para nucleación homogénea está dado por

$$r^* = \frac{2\sigma_{sl}T_f}{\Delta H_f \Delta T} \quad (2)$$

Donde ΔH_f es la entalpia de fusión por unidad de volumen, T_f es la temperatura de fusión y ΔT es el subenfriamiento del líquido (fig. 2.1). La entalpia de fusión es el calor liberado durante la transformación de líquido a sólido. En la ecuación 2 se puede observar la relación entre el subenfriamiento y el radio crítico de nucleación, donde se observa que ambos parámetros son inversamente proporcionales, esto es, al incrementar el subenfriamiento el radio crítico disminuye¹¹.

2.3.2 Nucleación Heterogénea

Salvo en experimentos de laboratorio con condiciones controladas, la nucleación homogénea casi nunca ocurre en líquidos debido a la barrera de energía libre superficial de los núcleos. Sin

embargo, una forma de reducir la magnitud de esta barrera es mediante la nucleación sobre una superficie existente. De esta forma, un radio de curvatura mayor al radio crítico de nucleación se forma con muy poca superficie entre el líquido y el sólido. Relativamente pocos átomos se necesitan agrupar para producir una partícula sólida que tenga el radio de curvatura necesario. Un subenfriamiento mucho menor se requiere para alcanzar el tamaño crítico, lo que favorece la nucleación. Este proceso en general es conocido como nucleación heterogénea.

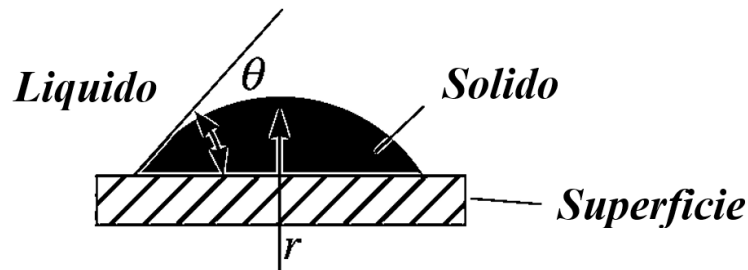


Figura 2.3 Mecanismo de Nucleación Heterogénea.

El cambio total de energía ΔG esta dado como

$$\Delta G = \left[\frac{4}{3} \pi r^3 \Delta G_v + 4 \pi r^2 \sigma_{sl} \right] \left[\frac{2-3S+S^3}{4} \right] \quad (3)$$

Donde S es $\cos(\theta)$. Si se comparan las ecuaciones 1 y 3 se observa que la unica diferencia entre estas es el termino entre corchetes de la derecha de la ecuacion 3. El radio critico r^* para la nucleacion heterogenea esta dado como

$$r^* = \frac{2\sigma_{sl}T_f}{\Delta H_f\Delta T} \text{sen}(\theta) \quad (4)$$

Esta ecuacion demuestra la dependencia del radio critico con el angulo θ . Cuando θ disminuye, el valor de r^* disminuye tambien, por lo que el volumen sera cada vez menor, y por consiguiente se requerira una menor cantidad de atomos para su formacion.

La comparación del gasto energético y del numero de átomos cuyo movimiento esta involucrado para conformar un núcleo de las dimensiones criticas permite probar de manera inequívoca que la nucleación heterogénea es la menos costosa desde el punto de vista energético y también es la que menor numero de átomos involucra lo cual nos permite explicar la razón por la cual durante la solidificación de metales puros y aleaciones existe siempre una nucleación heterogénea¹¹.

2.4 Importancia del Modelado de la Solidificación

Como ya se ha mencionado anteriormente, la solidificación es un fenómeno de suma importancia a nivel industrial en muchos aspectos; actualmente, con el desarrollo de la computación, las industrias buscan optimizar sus procesos para obtener una mayor rentabilidad. Es aquí donde entra la modelación matemática ya que permite simular los procesos de tal forma que se puede conocer los resultados de forma aproximada en muchos casos, reduciendo así los costos de operación o de consumo de recursos.

En el caso de la solidificación, en los últimos años se han aplicado varios métodos numéricos para resolver computacionalmente varios problemas durante el enfriamiento de metales y aleaciones. La solidificación es un proceso enormemente afectado por la transferencia de calor. La transferencia de calor en este tipo de procesos puede ser realmente compleja, estando compuesta por mecanismos complejos de conducción, convección, radiación y transformaciones de fase. Además, la medición precisa de las condiciones de frontera es muy difícil experimentalmente, sumado al hecho de que los datos termo-físicos para el sistema estudiado no se encuentren disponibles.

De aquí surge la necesidad de desarrollar métodos experimentales para obtener datos termo-físicos del sistema en cuestión de forma precisa y fiable, ya que de estos depende que el modelo matemático sea capaz de dar un resultado confiable, en el cual se puedan basar posteriores modificaciones al proceso para su optimización.

2.5 Propiedades Termodinámicas a Altas Temperaturas

Estudios de los requerimientos de la industria muestran una necesidad urgente por datos confiables de propiedades termo-físicas de los materiales a altas temperaturas (metales, escorias y refractarios). Esta necesidad nace del hecho de que las propiedades termo-físicas han probado ser extremadamente útiles a la hora de optimizar tanto el control del proceso como la calidad del producto. Estas propiedades son necesarias principalmente en dos campos:

1. En la solución directa de problemas industriales.
2. Como datos de entrada en el modelado matemático de procesos.

Un ejemplo del uso directo de propiedades físicas es el caso de la 'Penetración de soldadura variable' en la soldadura tipo TIG de aceros. Algunas aplicaciones requieren un largo número de soldaduras (como los intercambiadores de calor). En estos casos las condiciones de soldado óptimas

son establecidas en pruebas preliminares. Sin embargo, algunas veces estas condiciones no son exactamente las óptimas resultando en soldaduras muy superficiales, lo cual las hace débiles.

El modelado matemático provee una herramienta invaluable para optimizar un proceso y por ende la calidad del producto. Existen varios tipos de modelos matemáticos, basados en termodinámica, cinética y flujo de fluidos o calor en el proceso.

Los defectos en una colada pueden resultar en el rechazo de la pieza de fundición. Se ha estimado que el costo de retornos es mayor a los 2 billones US\$ por año¹². Modelos matemáticos de flujo de fluidos y transferencia de calor se han desarrollado para predecir la localización de los defectos. Ha sido demostrado que la predicción precisa de defectos requiere datos de propiedades termo-físicas precisos para la aleación colada. Se han desarrollado modelos similares para la predicción de microestructura (como por ejemplo el espaciamiento interdendrítico secundario). Estas propiedades son necesarias para el procesamiento y uso de metales y aleaciones, escorias, vidrios y fundentes. Las mediciones de estas propiedades requieren de tiempo y una considerable experiencia por parte del investigador. Consecuentemente, es una tarea enorme proveer todos los datos termo-físicos de todos los materiales usados en los varios procesos industriales.

2.6 Coeficiente de Transferencia de Calor

Uno de los parámetros más importantes y más difíciles de medir es el coeficiente de transferencia de calor, comúnmente representado como h . Este parámetro depende de muchos factores, como los materiales y fluidos involucrados en el transporte de calor, así como la geometría de los mismos y la temperatura de trabajo.

En el caso de los procesos de solidificación, el valor del coeficiente h depende del mecanismo de transporte en la interfaz solido/molde. Sin embargo, esta interfaz es dependiente de la etapa en la que se encuentre el proceso.

En la etapa previa al inicio de la solidificación, el contacto entre el metal líquido y el molde se puede asumir perfecto. En este caso, la transferencia de calor se da por conducción y convección del metal líquido a la pared del molde, a su vez el calor transferido al molde es transferido al exterior mediante los mecanismos de convección y de radiación.

Al comenzar la solidificación, el metal se contraerá opuesto a la pared del molde por lo que se formara un brecha de aire o resquicio, constituyendo así una resistencia térmica adicional. El molde y el metal solido tendrán un contacto parcial. En esta etapa, la transferencia de calor será por conducción en las zonas de contacto metal/molde y por convección y radiación a través de la zona de contacto metal/aire.

En la etapa posterior a la solidificación, el metal estará completamente separado del molde y la transferencia de calor será a través del aire por convección y radiación.

De lo anterior, es fácil ver que la obtención analítica o experimental de los coeficientes de transferencia de calor en cada etapa es realmente complicada por lo que surge la necesidad de sobrepasar esta gran limitante.

2.6.1 Coeficiente de Transferencia de Calor Global

En muchas aplicaciones es común encontrar que se tiene transferencia de calor combinada, es decir, involucra conducción, convección y radiación, a través de diferentes materiales, lo cual dificulta enormemente la obtención de los coeficientes de transferencia de calor de cada etapa; en estos casos convenientemente se utiliza un '*coeficiente de transferencia de calor global (U)*' para los cálculos de transferencia de calor, ya que este combina todos los factores constituyentes en uno solo, entre estos factores se incluyen

- Propiedades termo-físicas del fluido de los alrededores.
- Geometría y rugosidad superficial
- Tipo de flujo de fluido.
- Características espectrales de la superficie de radiación.
- Transferencia de calor por radiación (se hace lineal)
- Diferencias totales de temperatura.

El concepto de coeficiente de transferencia de calor global, U , provee una aproximación ingenieril para caracterizar un sistema con procesos térmicos complejos, incluyendo la transferencia de calor por convección y radiación a través del air-gap en las paredes de un molde, o la pérdida de calor por radiación y enfriamiento con aspersores de una pieza de colada continua.

Los coeficientes de transferencia de calor de tales procesos son, en esencia, empíricos, aunque ingenieros han aprendido como correlacionar estos coeficientes con un número de procesos importantes y variables de control usando la física de la transferencia de calor, además de la mecánica de fluidos tanto para flujo laminar como para flujo turbulento, y para intercambios de calor radiactivo a altas temperaturas que ocurren bajo condiciones de cuerpo negro, cuerpo gris o cuerpo especular¹⁴.

Capítulo 3

Modelo Matemático y Resolución Numérica

3.1 Planteamiento del Sistema

Se considera el enfriamiento de un metal desde su fase líquida hasta la temperatura ambiente en un crisol de geometría cilíndrica, el cual está recubierto con una pintura refractaria tanto en su cara interna como en la externa. Se asume que la transferencia de calor se da únicamente por la pared lateral del cilindro siendo nula en la base y en la tapa, que experimentalmente están aisladas térmicamente. En la figura 3.1 se observa un esquema con todas las partes del sistema a modelar.

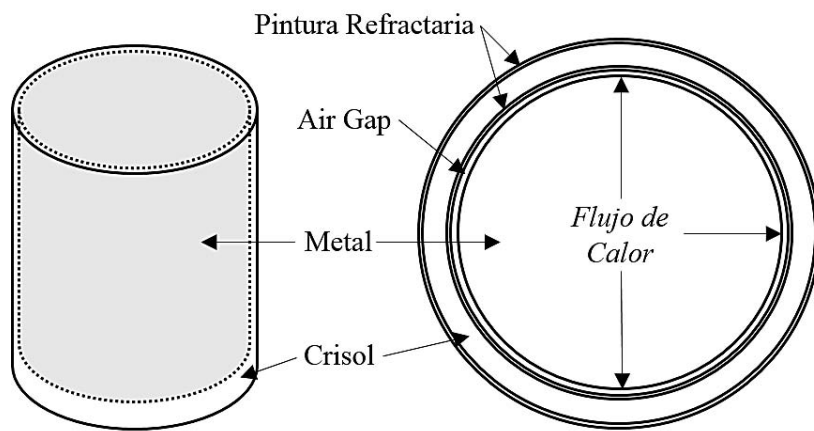


Figura 3.1 Sistema Crisol-Metal

3.2 Transferencia de Calor durante la Solidificación

Durante la solidificación de un metal en un molde metálico se asume la existencia de tres etapas, enfriamiento del líquido, solidificación y enfriamiento del sólido. En cada una de estas etapas ocurren diferentes mecanismos de transferencia de calor; sin embargo, la respuesta térmica del sistema en las etapas de enfriamiento puede ser simplificada usando un coeficiente de transferencia de calor global¹⁵.

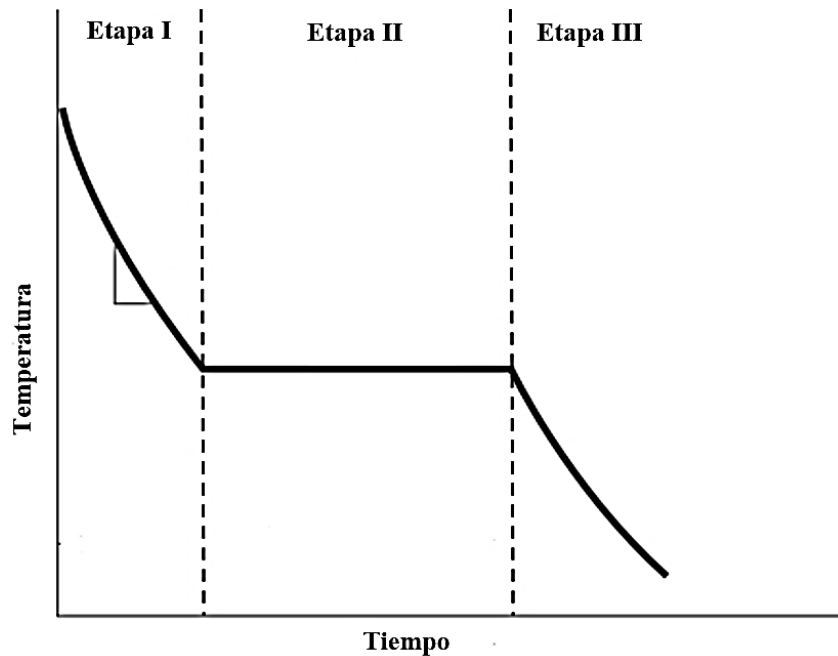


Figura 3.2 Etapas consideradas durante el enfriamiento de un metal puro.

3.2.1 Etapa I. Enfriamiento del Líquido

En la Etapa I se tiene convección del metal líquido a la pared crisol-pintura, conducción a través de la pared del crisol-pintura y convección de la pintura a los alrededores. Las resistencias térmicas en esta etapa son las presentes en la capa de pintura refractaria interna, la pared del crisol, la capa de pintura refractaria externa y el aire (que incluye radiación y convección); esto se ve en la figura 3.3

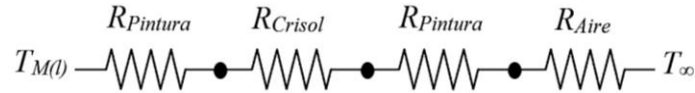


Figura 3.3 Resistencias térmicas consideradas en la etapa I.

El calor intercambiado (Q) por un sólido (con masa m y capacidad calorífica específica Cp) con sus alrededores esta dado como:

$$Q = mCp\Delta T \quad (5)$$

Dado que el sistema se encuentra en régimen transitorio, la ecuación 5 reescrita en forma diferencial está dada como:

$$\frac{dQ}{dt} = mCp \frac{dT}{dt} \quad (6)$$

Dado que las resistencias térmicas del sistema se encuentran en serie, el coeficiente de transferencia de calor global en la etapa I (U_I) está dado como:

$$\frac{1}{U_I} = R_{Pintura} + R_{Crisol} + R_{Pintura} + R_{Aire} \quad (7)$$

Este coeficiente, que incluye los diferentes mecanismos de transferencia de calor, describe el cambio de la energía del sistema con respecto al tiempo, esto es:

$$\frac{dQ}{dt} = -U_I A_{\perp} (T - T_{\infty}) \quad (8)$$

Donde A_{\perp} , T y T_{∞} son el área transversal al flujo de calor, la temperatura instantánea y la temperatura de los alrededores respectivamente.

Al igualar las ecuaciones 6 y 8 se tiene la ecuación que describe el cambio de la temperatura con respecto al tiempo en esta etapa:

$$-U_I A_{\perp} (T - T_{\infty}) = mCp \frac{dT}{dt} \quad (9)$$

3.2.2 Etapa II. Solidificación

En la Etapa II, debido a que la solidificación es un proceso exotérmico, la temperatura se mantiene aproximadamente constante y ligeramente inferior a la temperatura de fusión durante el tiempo necesario para que se libere la energía equivalente a la entalpía de fusión del metal, H_f . Existen diferentes formas de aproximar la solución a este problema, en este estudio se compararan dos de estas aproximaciones.

3.2.2.1 Método de Recuperación de Temperatura

Este método consiste en convertir la entalpía de fusión del metal en un número de grados equivalentes mediante el cociente entre la entalpía y el Cp. Este delta de temperatura esta dado como:

$$\Delta T_{eq} = \frac{H_f}{C_p} \quad (10)$$

Esta diferencia de temperatura disminuye con cada paso de tiempo (Δt); esta disminución es constante y está dada como:

$$\Delta T_i = \frac{dT}{dt} \Delta t = - \frac{U_{II} A_{\perp} (T_f - T_{\infty})}{m C_p} \Delta t \quad (11)$$

Cuando ΔT_{eq} es menor o igual a cero la solidificación termina, marcando el inicio del enfriamiento del sólido. Este método aunque muy práctico y fácil de aplicar, no se apega a la realidad del sistema ya que no considera el cambio de la fracción solida con respecto al tiempo por lo que no es un método muy exacto.

3.2.2.2 Método del Calor Especifico Equivalente

Este método considera el término de generación de energía (solidificación), el cual es función del cambio de la fracción solida con respecto al tiempo. La ecuación diferencial de balance de energía que incluye el término de liberación del calor latente de solidificación para el sistema está dada como:

$$mC_p \frac{dT}{dt} = -U_{II} A_{\perp} \Delta T + mH_f \frac{df_s}{dt} \quad (12)$$

Donde f_s es la fracción sólida. El termino de generación de calor se puede reescribir como:

$$mH_f \frac{df_s}{dt} = mH_f \frac{df_s}{dT} \frac{dT}{dt} \quad (13)$$

Si se sustituye esta ecuación en la ecuación 10 y se re arregla se llega a:

$$-U_p A_{\perp} \Delta T = m \left(C_p - H_f \frac{df_s}{dT} \right) \frac{dT}{dt} \quad (14)$$

Ecuación en la cual se tiene que evaluar el termino df_s/dT para poder ser resuelta.

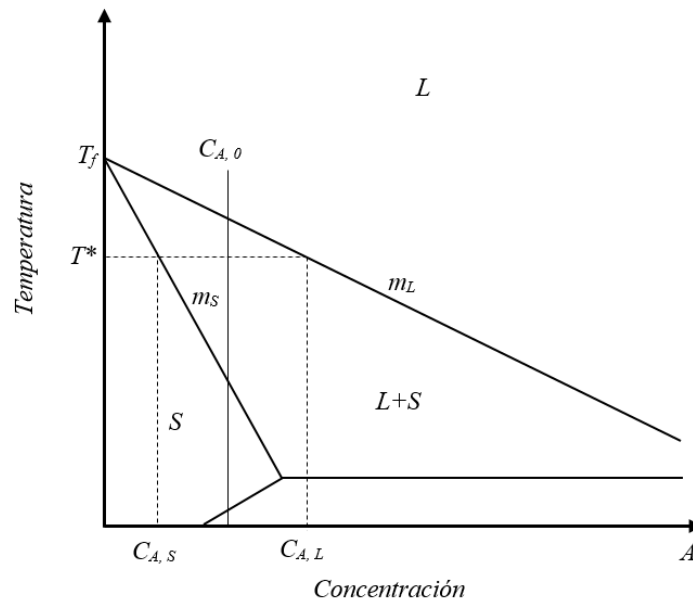


Figura 3.4 Parte de un Diagrama Eutéctico Idealizado

Considérese el diagrama eutéctico de la figura 3.4, en el cual las líneas de liquidus y solidus son consideradas como rectas. Las ecuaciones de estas líneas son de la forma:

$$T = T_f - m \cdot C \quad (15)$$

Si se aplica la regla de la palanca, la fracción sólida de una aleación con composición $C_{A,0}$ está dada como:

$$f_s = \frac{C_{A,L} - C_{A,0}}{C_{A,L} - C_{A,S}} \quad (16)$$

Definiendo el coeficiente de partición como:

$$k_0 = \frac{C_{A,S}}{C_{A,L}} \quad (17)$$

Si se evalúa la ecuación 13 para cuando $m = m_L$ y $C = C_{A,0}$, $C = C_{A,L}$ se llega a que :

$$C_{A,0} = \frac{T_L - T_f}{m_L} \quad (18)$$

$$C_{A,L} = \frac{T - T_f}{m_L} \quad (19)$$

Si se sustituyen las ecuaciones 15, 16, 17 en la ecuación 14, después de un arreglo algebraico, la fracción sólida queda dada como:

$$f_s = \frac{T - T_L}{(1 - k_0)(T - T_f)} \quad (20)$$

Derivando f_s con respecto a T :

$$\frac{df_s}{dT} = \frac{T_L - T_f}{(1 - k_0)(T - T_f)^2} \quad (21)$$

Esta ecuación permite que la ecuación 12 pueda ser resuelta puesto que se permite evaluar el cambio de la fracción sólida en función de la temperatura. Este método, si bien, es más apegado a la realidad del sistema, no es apropiado para un metal puro puesto que la diferencia $T_L - T_f$ es igual a cero; sin embargo una aproximación es suponer una $C_{A,0}$ cercana a 0, del orden de 0.1. Si bien esta aproximación podría parecer no apropiada para un metal puro, es justo recordar que la pureza

de los metales aquí estudiados es de grado comercial, lo que significa que contienen impurezas del orden de 0.01-0.1 % por lo que no es algo incorrecto suponer esta aproximación.

3.2.3 Etapa III. Enfriamiento del Sólido

Esta etapa es muy similar a la etapa I, las diferencias entre estas etapas se refleja en las resistencias térmicas presentes durante el enfriamiento del sólido, las cuales están dadas como:

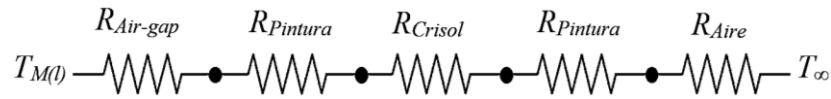


Figura 3.5 Resistencias térmicas consideradas en la etapa III.

Dado que no se tiene generación de calor, haciendo un balance de energía similar al realizado para la etapa I, se llega a que el cambio de la temperatura con respecto al tiempo está dado como:

$$-U_{III}A_{\perp}(T - T_{\infty}) = mCp \frac{dT}{dt} \quad (22)$$

3.3 Cálculo Numérico del Coeficiente de Transferencia de Calor Global

El coeficiente de transferencia de calor global es función de la temperatura, sin embargo, dado que el cálculo analítico es demasiado complejo, una forma práctica de obtenerlo es mediante diferencias finitas si se tiene la curva de enfriamiento. El termino dT/dt queda dado como:

$$\frac{dT}{dt} \approx \frac{\Delta T}{\Delta t} = \frac{T^{i+1} - T^{i-1}}{t^{i+1} - t^{i-1}} \quad (23)$$

Aplicando esta aproximación a las ecuaciones 9 y 20, se puede calcular el coeficiente U en cada instante de temperatura con un método numérico similar al método de recuperación de temperatura, es decir, por cada valor de temperatura se hace una iteración del coeficiente U para calcular una temperatura cercana a la temperatura experimental con la ecuación 22, dependiendo

del valor obtenido se incrementa o disminuye el valor de U hasta hacer coincidir la temperatura calculada con la temperatura experimental.

$$T = T_{\infty} - \frac{mCp\frac{\Delta T}{\Delta t}}{A_{\perp}U} \quad (24)$$

A continuación se muestra el algoritmo de cálculo del coeficiente U ; donde CE y DCE son la curva de enfriamiento y su derivada numérica respectivamente.

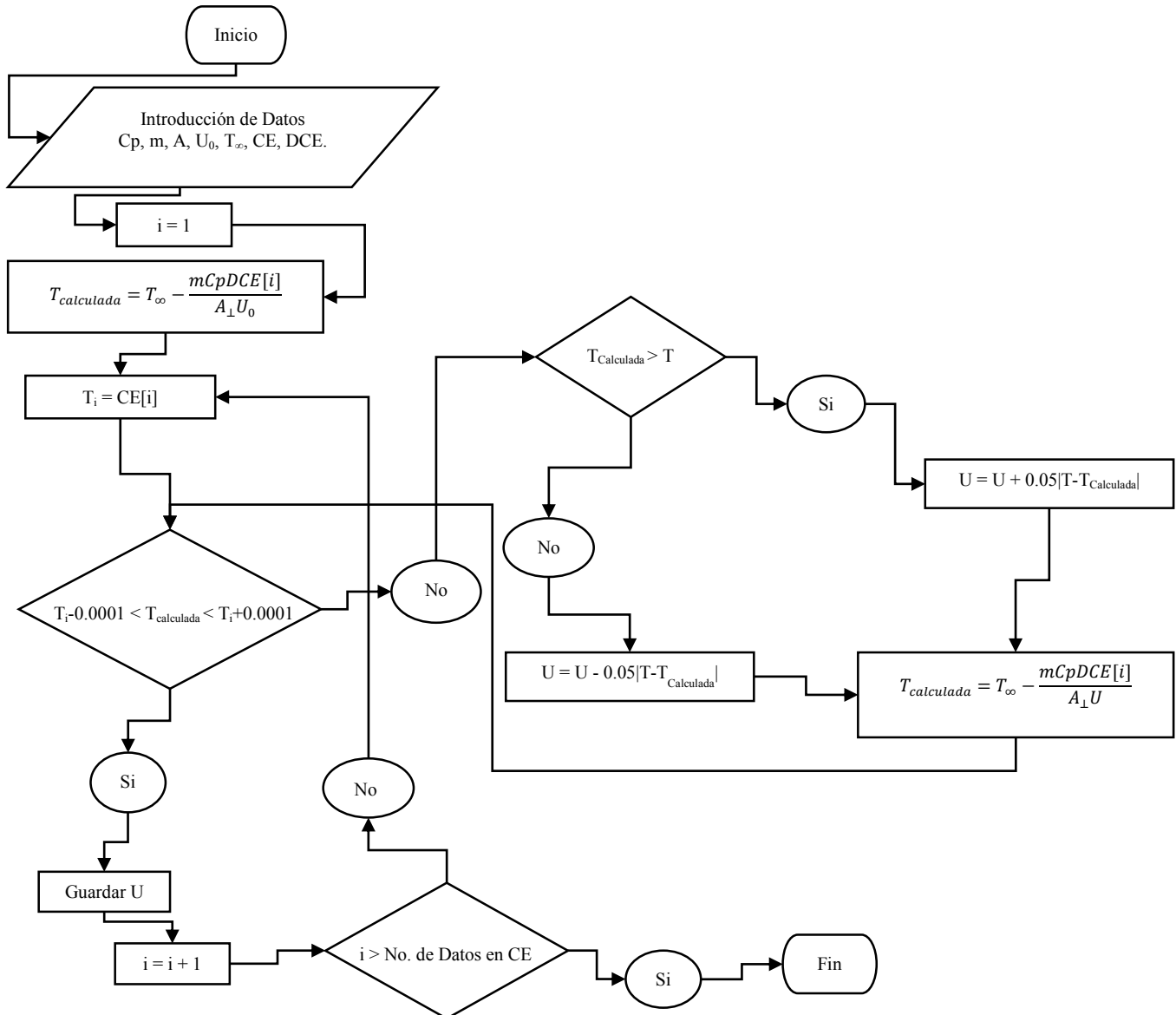


Figura 3.6 Algoritmo de cálculo computacional del coeficiente U .

3.4 Validación del Coeficiente mediante un Modelo Mecanístico

El modelo matemático para la curva de enfriamiento de un metal puro, depende de las propiedades termo-físicas del sistema, principalmente del coeficiente U . Las ecuaciones 9, 12 y 20 describen el cambio de la temperatura con respecto al tiempo en cada etapa durante el enfriamiento y solidificación de un metal puro. Estas ecuaciones pueden resolverse numéricamente mediante el método de Euler. Este método es ampliamente usado para resolver ecuaciones diferenciales ordinarias con una sola variable independiente de la forma:

$$\frac{dy}{dx} = f(x, y)$$

De forma general, este método extrapola el valor de la función en un punto nuevo a partir de un punto anterior con una pendiente estimada, esto es:

$$y^{i+h} = y^i + \frac{\Delta y}{\Delta x} * h$$

De esta manera, este método permite encontrar paso a paso un valor de la función y así trazar la solución de la ecuación diferencial.

Aplicando este método, la temperatura instantánea en cada etapa quedaría dada como:

$$T^{t+\Delta t} = T^t + \frac{dT}{dt} \cdot \Delta t \quad (25)$$

De donde el cálculo del termino dT/dt varía dependiendo de en qué etapa se encuentre la temperatura. Este término se obtiene de las ecuaciones 9, 14 y 22, quedando como:

$$\begin{aligned} I. \quad \frac{dT}{dt} &= -\frac{U_I A_{\perp} (T - T_{\infty})}{m C_p} \\ II. \quad \frac{dT}{dt} &= -\frac{U_{II} A_{\perp} (T - T_{\infty})}{m (C_p - H_f \frac{df_s}{dT})} \\ III. \quad \frac{dT}{dt} &= -\frac{U_{III} A_{\perp} (T - T_{\infty})}{m C_p} \end{aligned}$$

3.5 Algoritmo Computacional

El algoritmo para el modelado mecánico calcula y guarda la temperatura en función del tiempo, la cual tiene un tiempo asociado a cada temperatura y que aumenta en Δt . A continuación se muestra el algoritmo usado para obtener la curva de enfriamiento calculada.

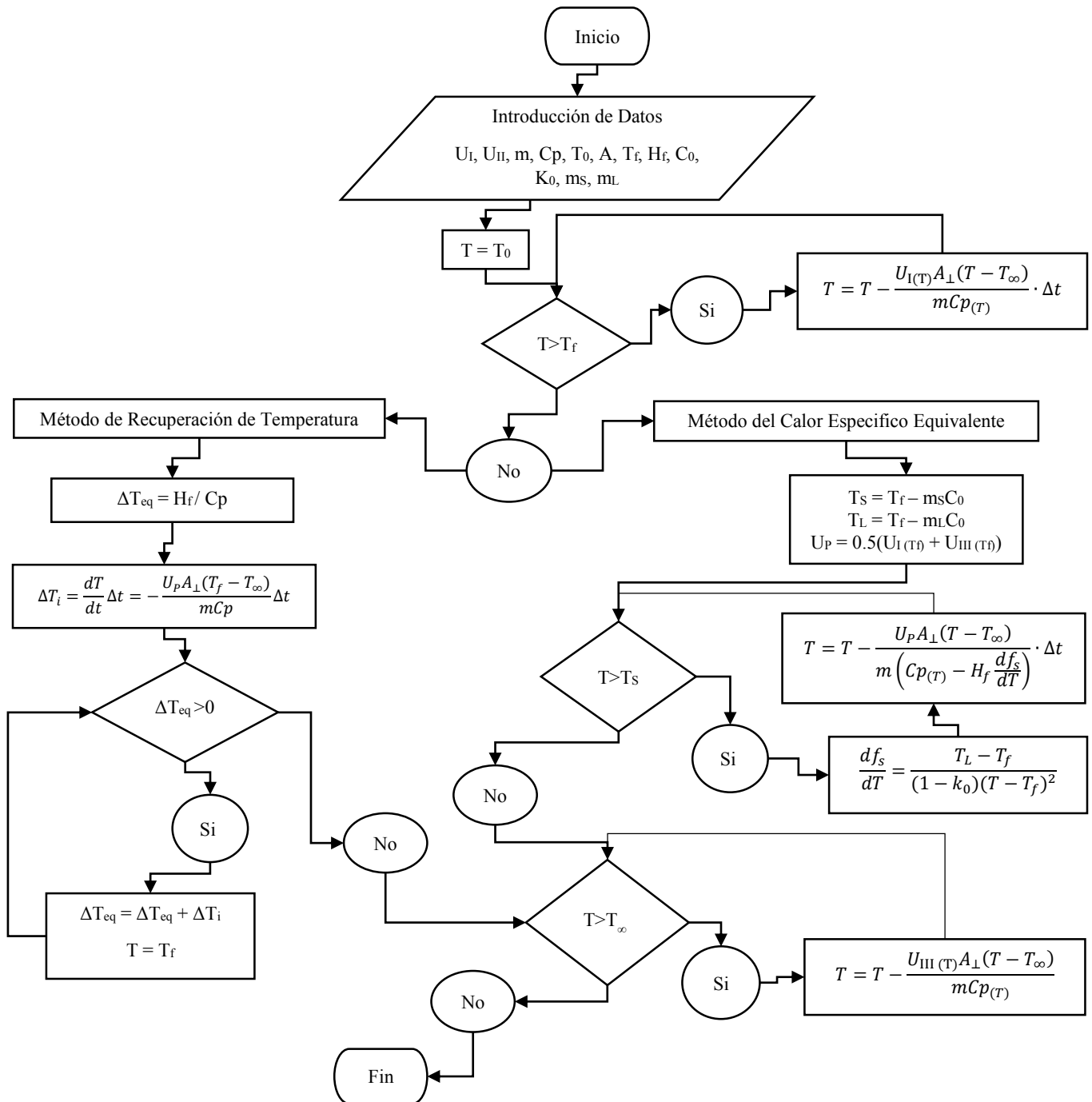


Figura 3.7 Algoritmo de Cálculo para el modelo de la Curva de Enfriamiento.

Capítulo 4

Procedimiento Experimental

4.1 Diseño Experimental

El procedimiento experimental tiene como fin la obtención de las curvas de enfriamiento de los metales a estudiar. El sistema experimental tiene ciertas características dadas para ajustarse al modelo planteado. Tal vez la más importante de estas es la que se hizo para evitar el flujo de calor en las base y parte superior del crisol, lo cual se logró con el uso de un aislante térmico, el asbesto, el cual con una conductividad térmica de 0.15 W/m/K permite suponer que el flujo de calor en estas direcciones es despreciable.

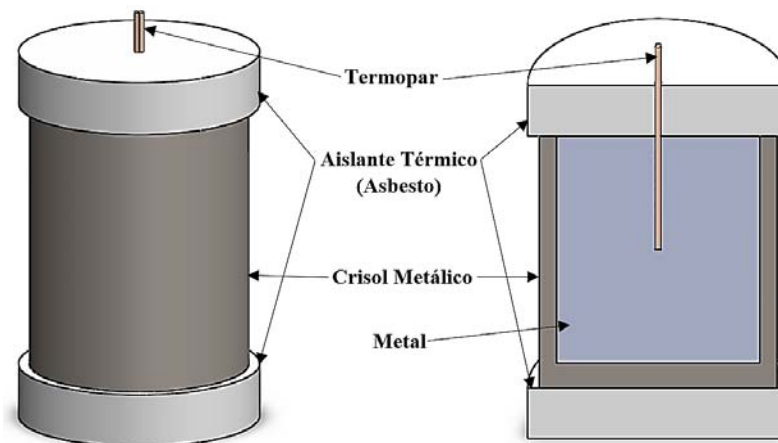


Figura 4.1 Arreglo del Sistema Experimental

Uno de los factores a estudiar fue el efecto del espesor del crisol, para lo cual se usaron dos crisoles de diferente espesor de pared con un solo metal. La medición de temperatura se realizó con un termopar tipo **K**, el cual se colocó de tal forma que la punta quedase en el centro del volumen del metal. La diferencia más importante entre los crisoles usados fue el espesor de pared ($D_{Cr} - D_m$), la cual fue de 1 y 3 mm para el Crisol 1 y el Crisol 2 respectivamente.

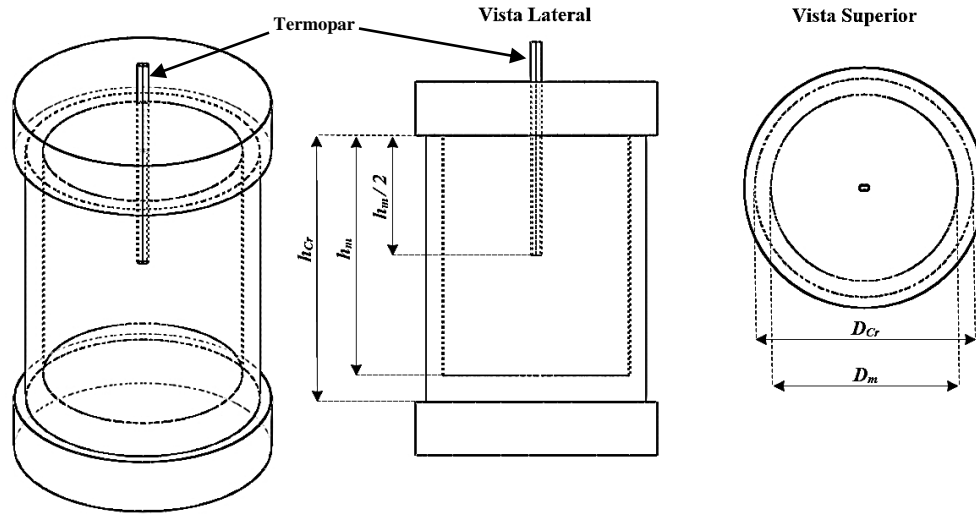


Figura 4.2 Sistema experimental con las dimensiones a considerar. Donde h_{cr} y h_m son la altura externa e interna del crisol y D_{cr} y D_m son el diametro externo e interno del crisol.

Otro factor importante a estudiar fue la velocidad de enfriamiento del sistema, para esto se dispuso de un sistema de enfriamiento que forzaba la convección del aire en los alrededores del sistema, este sistema soplabá aire con un flujo de 70 L/min. En la figura 4.3 se observa este arreglo.

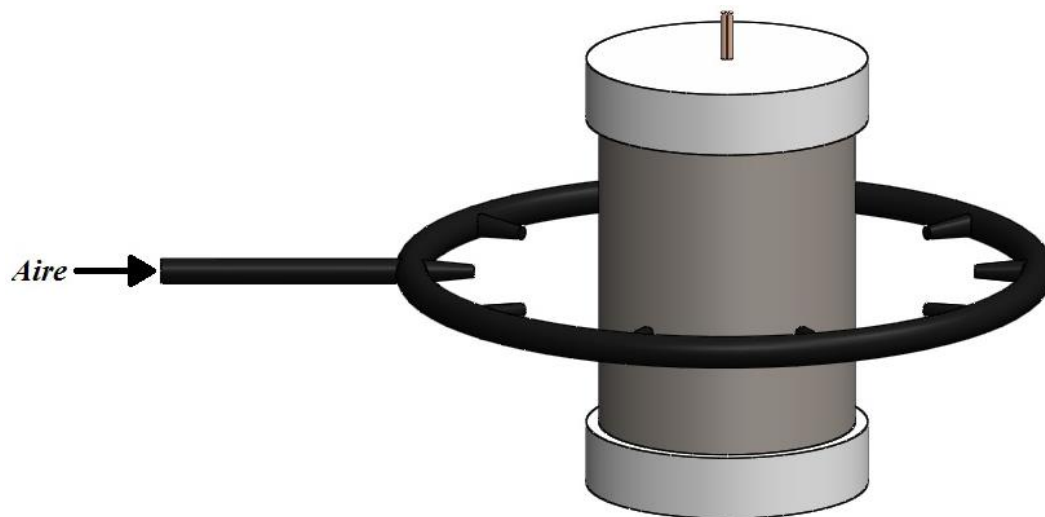


Figura 4.3 Sistema experimental con enfriamiento

4.2 Metodología de Trabajo

Los pasos realizados durante la experimentación, para todos los metales, se pueden resumir en las siguientes etapas:

- I. Fundición del metal en crisol refractario con mechero Meker.
- II. Vaciado a crisol de acero, el cual fue previamente recubierto con pintura refractaria.
- III. Recalentado inmediato durante 15 min en mufla a aproximadamente 100 °C por encima de la temperatura de fusión del metal.
- IV. Retiro de la mufla y aislamiento térmico con termopar (figura 4.1).
- V. En el caso de las muestras enfriadas, el sistema usado fue el mostrado en la figura 4.3.
- VI. Registro de la temperatura en función del tiempo hasta una temperatura de alrededor de 100 °C por debajo de la temperatura de fusión del metal.
- VII. Análisis de datos y procesamiento numérico.

El termopar utilizado para el monitoreo de la temperatura fue de tipo **K** (de aleaciones Cromel-Alumel), el registro de la temperatura se llevó a cabo con hardware y software especializado para este fin.

Cabe mencionar, que en el caso del estaño, se repitió el experimento tres veces, dos con crisoles metálicos de diferente espesor (Crisol 1 y 2) y una más con el sistema de enfriamiento.

Adicionalmente, en cada corrida experimental se usó un termopar extra, el cual registro la temperatura ambiente en cada instante de tiempo.

Capítulo 5

Resultados y Discusión

5.1 Curvas de Enfriamiento

A continuación se muestran todas las curvas de enfriamiento obtenidas en condiciones de convección natural y convección forzada para todos los metales estudiados.

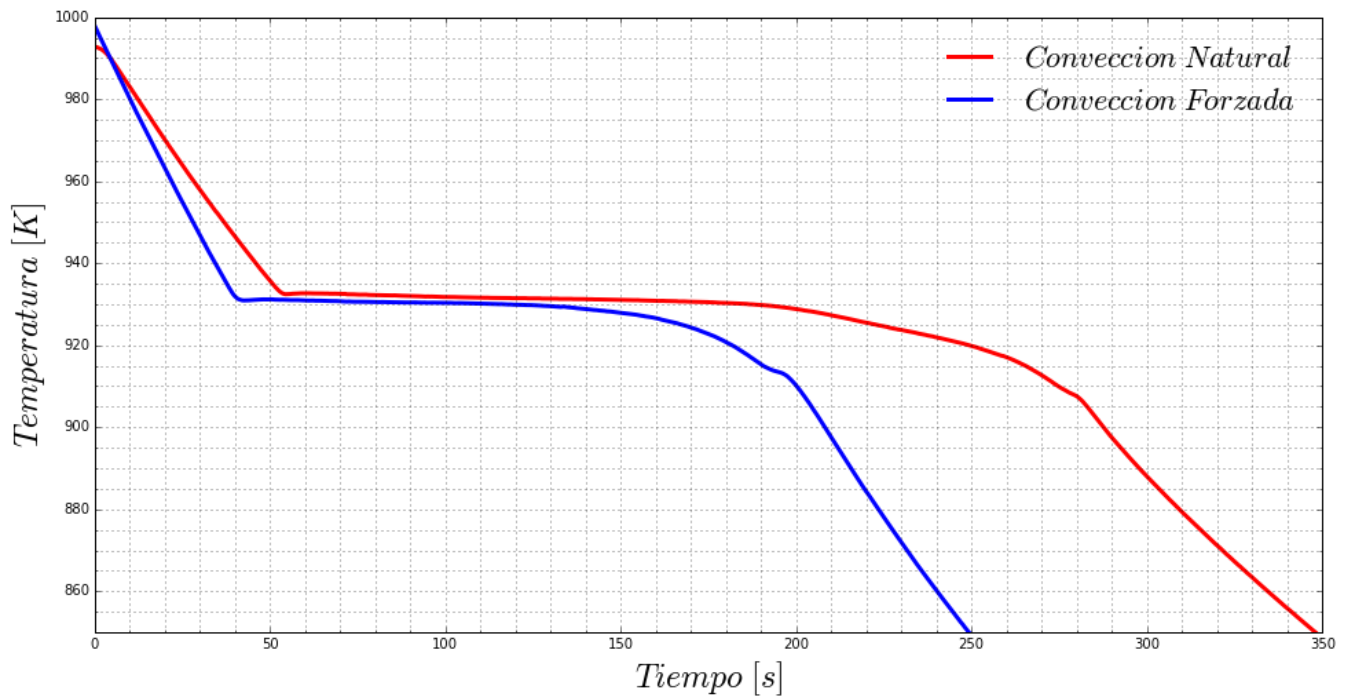


Figura 5.1 Curvas de enfriamiento del Aluminio

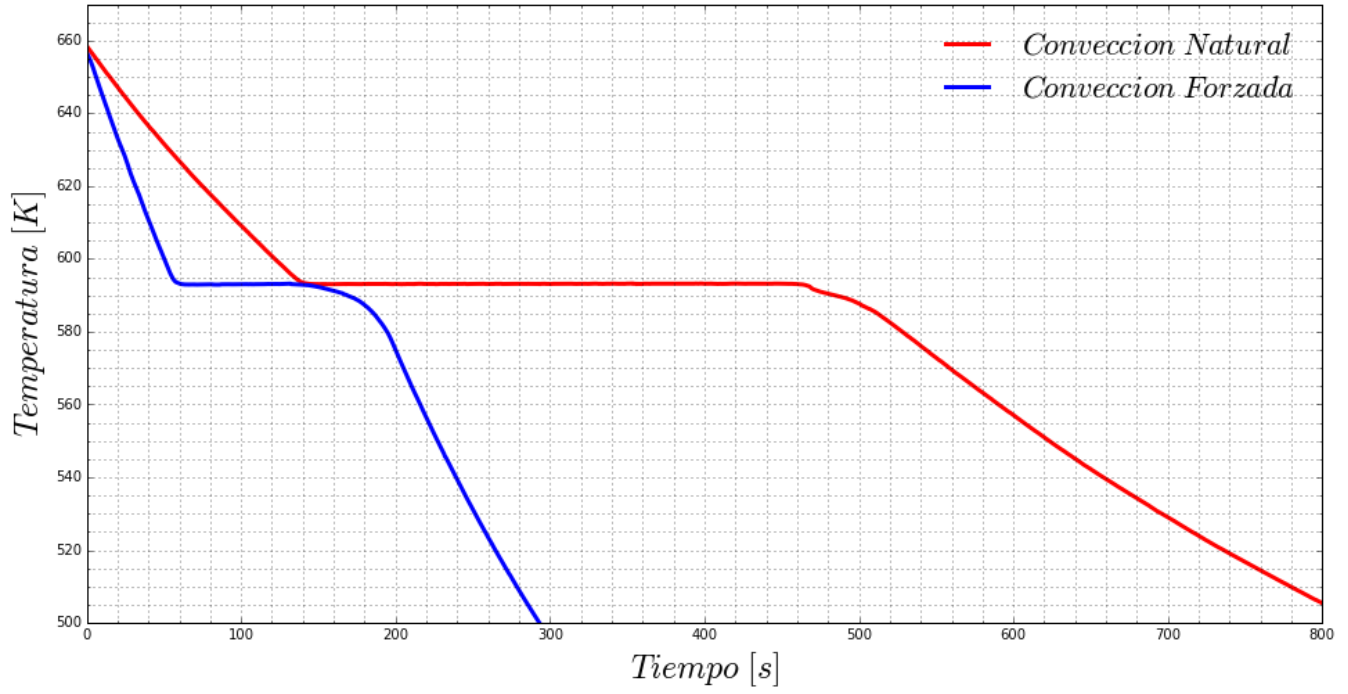


Figura 5.2 Curvas de enfriamiento del Cadmio

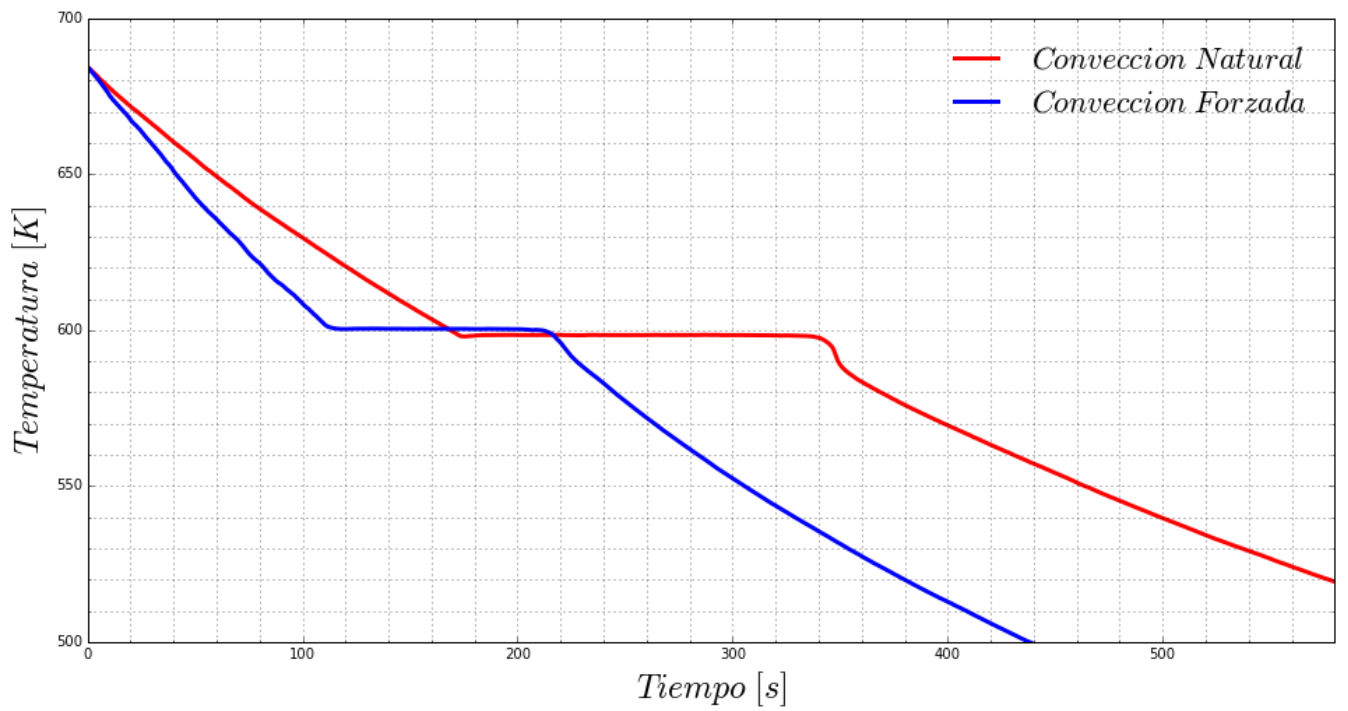


Figura 5.3 Curvas de enfriamiento del Plomo

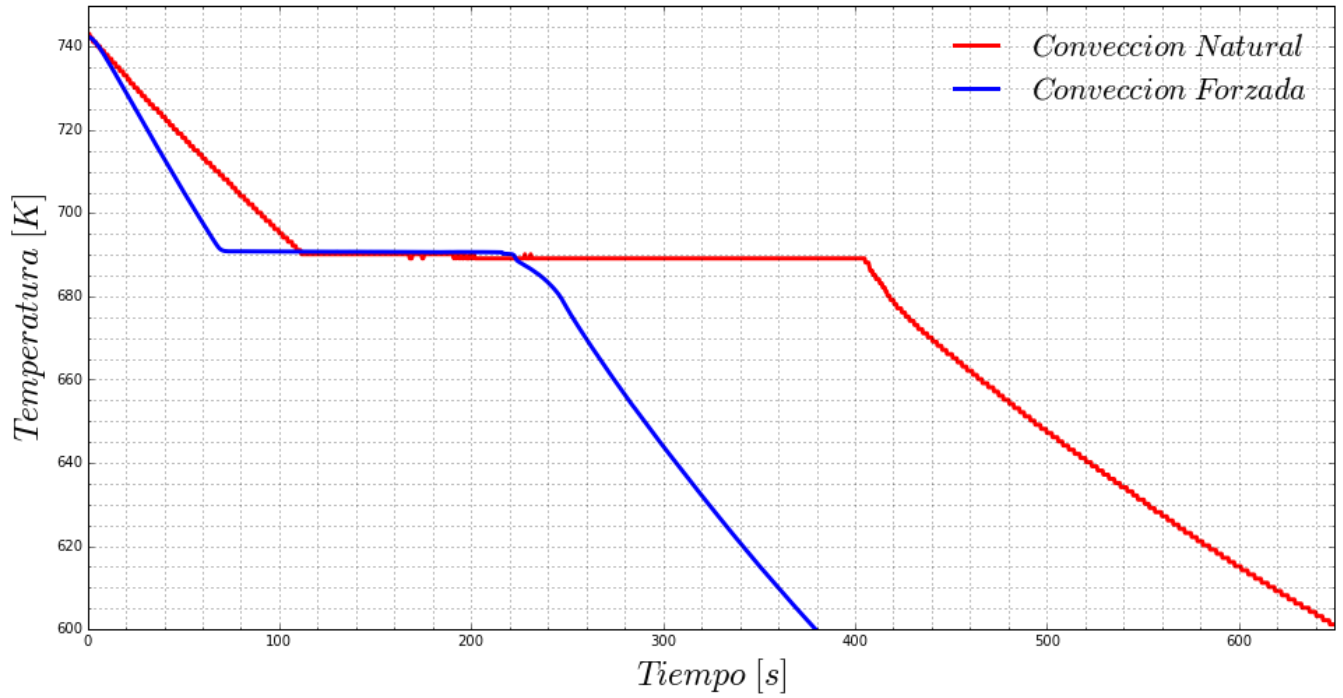


Figura 5.4 Curvas de enfriamiento del Zinc

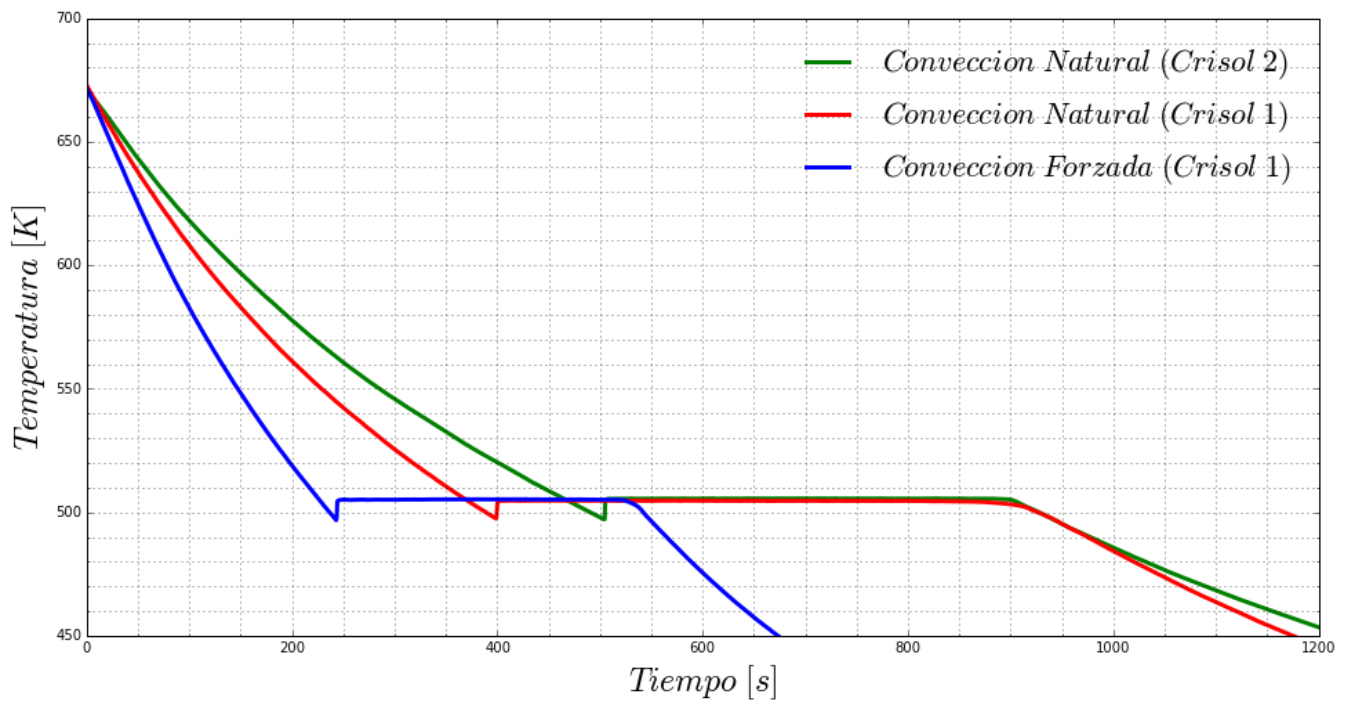


Figura 5.5 Curvas de enfriamiento del Estaiño

5.2 Análisis de Datos

El coeficiente de transferencia de calor U en función de la temperatura se obtiene mediante el análisis numérico de las curvas de enfriamiento de cada metal. A continuación, se muestra un ejemplo secuencial de la metodología llevada a cabo para este fin, se tomara la curva del Estaño (Crisol 1) como ejemplo.

5.2.1 Criterio de la Primera Derivada

Para el procesamiento de las curvas es necesario conocer el inicio y fin de la solidificación, ya que esta etapa es tratada de forma diferente, como se explica en el apartado 3.3.2. Aunque aparentemente estos puntos puedan ser obtenidos directamente de la curva de enfriamiento, no es correcto hacer esto debido al ruido contenido en los datos. Por esto, es necesario calcular la primera derivada de la curva de enfriamiento, la cual se calcula de forma numérica con diferencias finitas.

Dado que el registro de la curva de enfriamiento se realizó mediante un mecanismo termo-eléctrico, la señal obtenida tiene un ruido asociado; ruido que tal vez no sea visible en la curva de enfriamiento, sin embargo es muy evidente en la curva de la derivada numérica. Este ruido se elimina en cierta medida mediante el filtro de Savitzky-Golay.

Este filtro es ampliamente conocido y usado en el análisis de señales y tiene una gran aplicación como forma de eliminar el ruido de una lista de datos sin afectar la información contenida en estos.

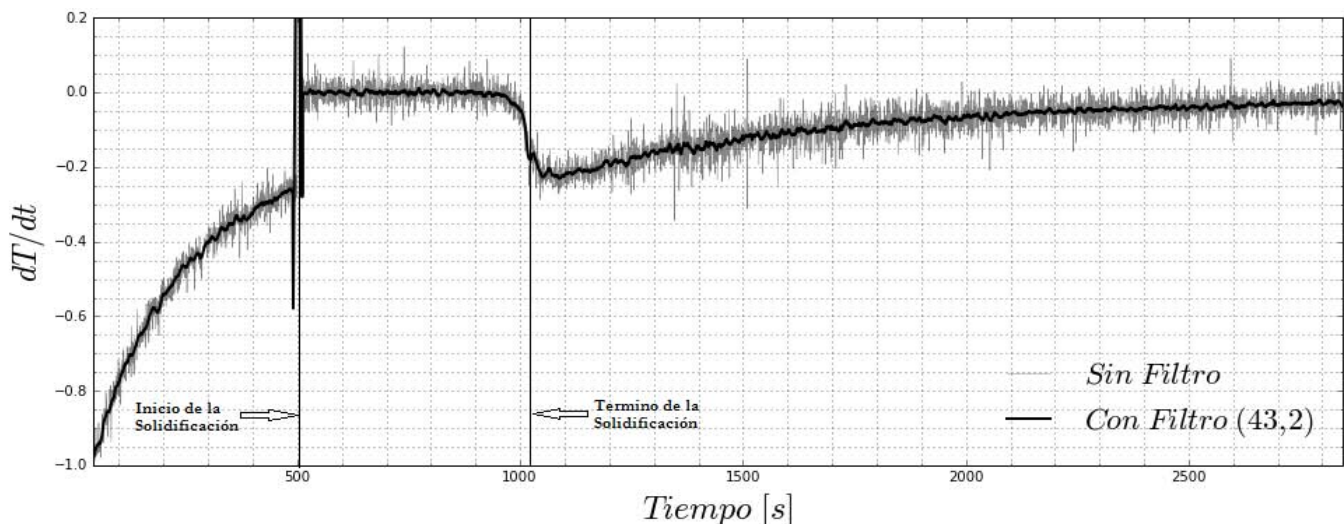


Figura 5.6 Derivada numérica de la curva de enfriamiento con y sin el filtro de Savitzky-Golay.

De esta forma es claro ver el tiempo de inicio y fin de la solidificación, los cuales se indican en la Fig. 5.4, y son fáciles de identificar sobre la curva de la primera derivada como el primer y el segundo punto de inflexión de una curva que muestra un aumento relativamente regular de la primera derivada hasta que debido a la liberación del calor latente se registra el súbito aumento de la señal, al inicio de la solidificación, así como el eventual regreso a los valores cuya tendencia se mostraba regular ascendente, al final de la solidificación.

5.2.2 Aplicación del Algoritmo Computacional

Una vez calculados los valores puntuales de la pendiente de la curva de enfriamiento e identificados los tiempos de inicio y fin de la solidificación, se puede calcular el coeficiente U en función de la temperatura en las etapas I y II con una serie de iteraciones sobre cada valor de la curva de enfriamiento con la ecuación 24; conforme al algoritmo mostrado en la figura 3.4.

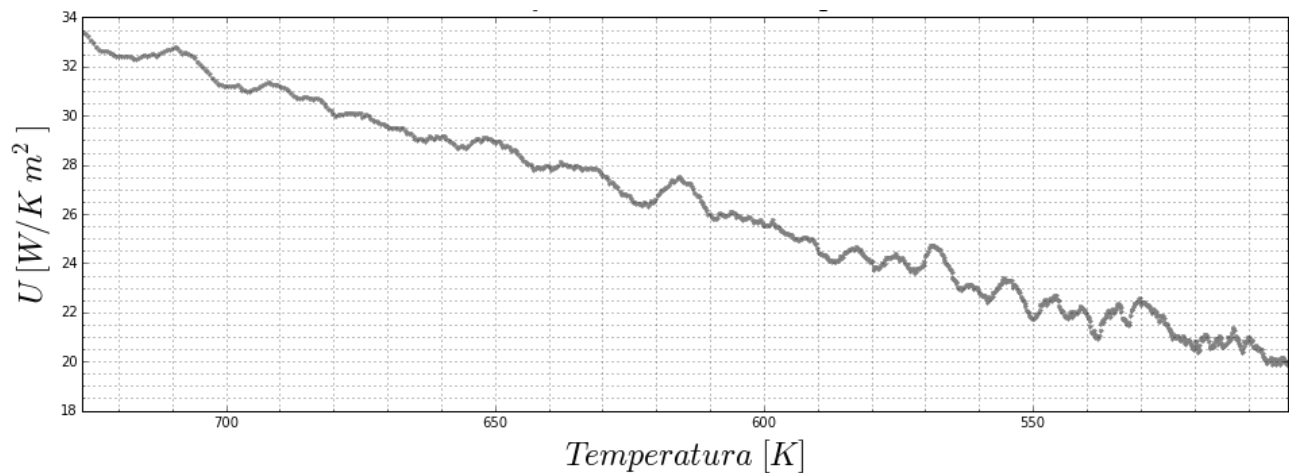


Figura 5.7 Coeficiente U en la etapa I de la curva de enfriamiento

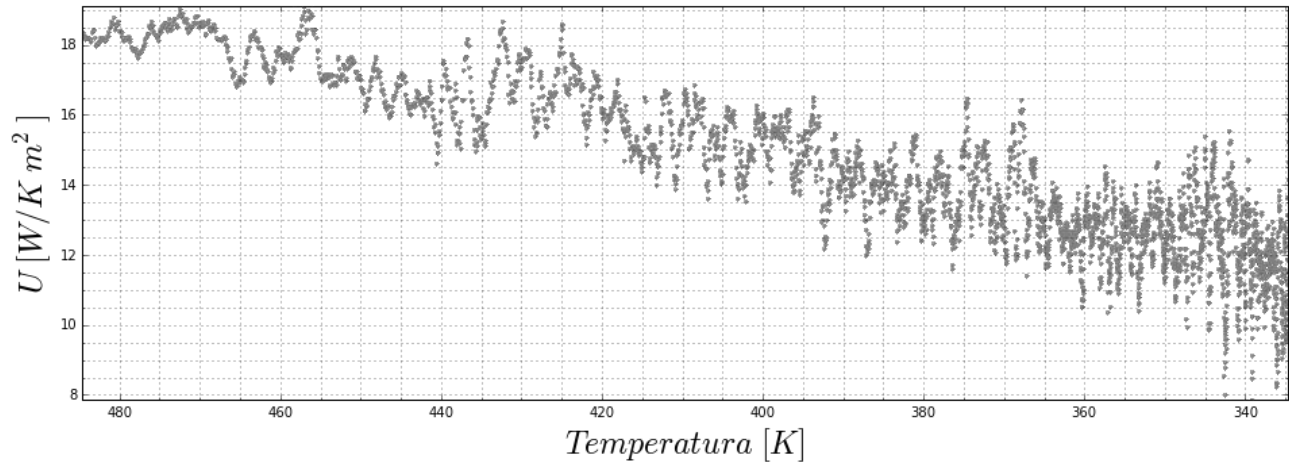


Figura 5.8 Coeficiente U en la etapa III de la curva de enfriamiento

5.2.3 Ajuste de Datos

Pese a la aplicación del filtro Savitzky-Golay sobre los datos experimentales, los resultados de U reflejan el ruido de la señal registrada, por lo que un ajuste de datos es lo más conveniente; un ajuste de la forma $a + bT^3$ fue el que se aplicó en todos los casos.

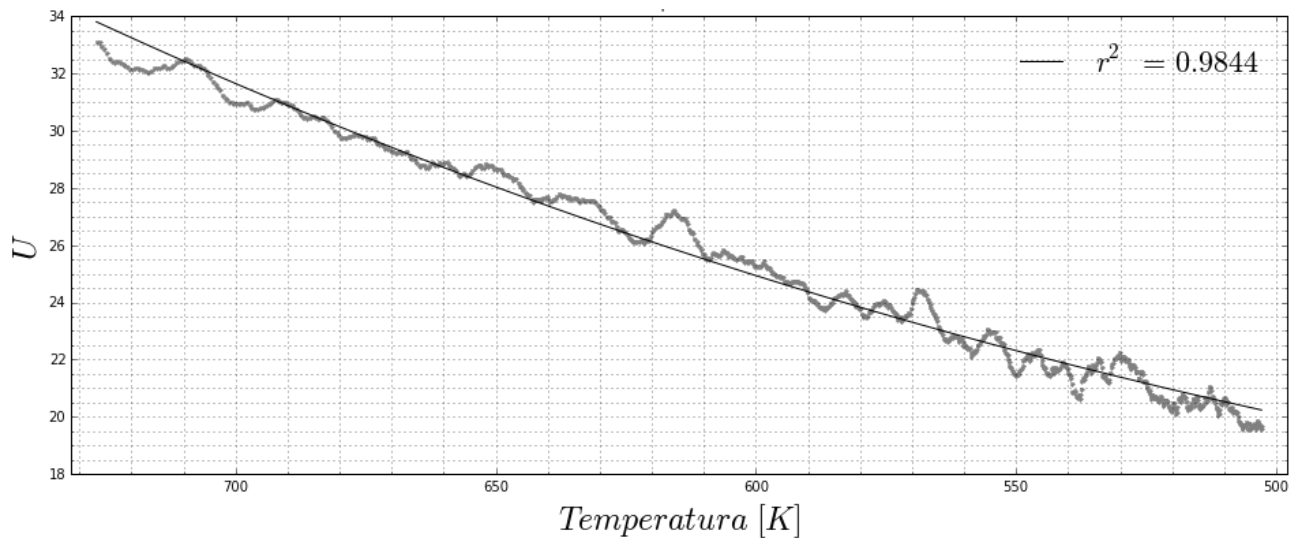


Figura 5.9 Coeficiente U con un ajuste estadístico en la etapa I de la curva de enfriamiento, se muestra el coeficiente de determinación (r^2) el cual indica la calidad del modelo para replicar los datos.

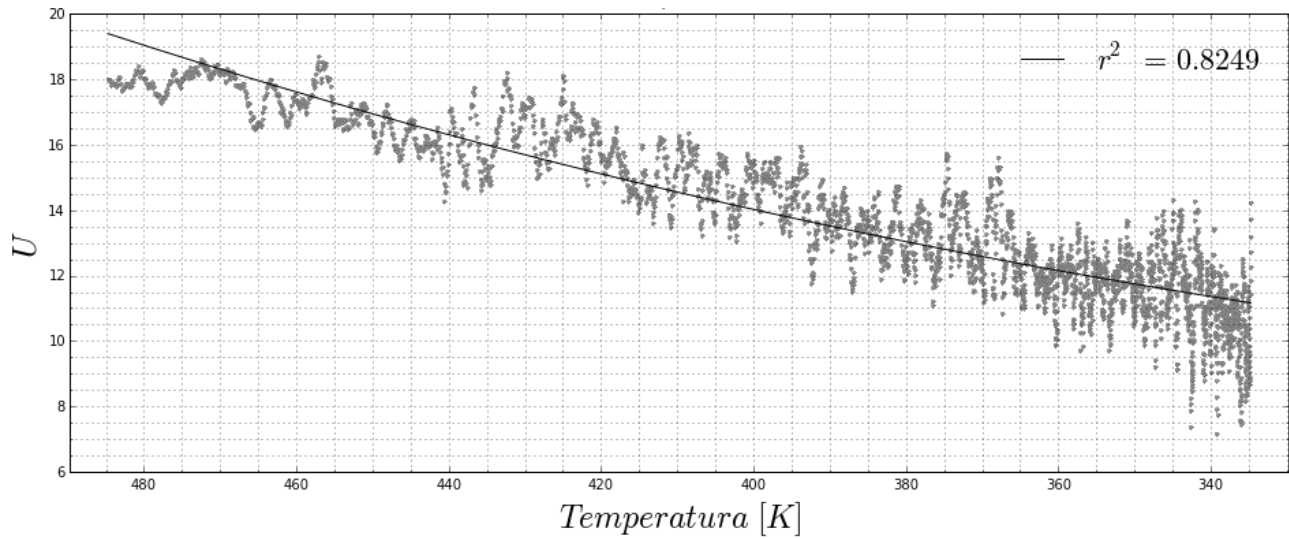


Figura 5.10 Coeficiente U con un ajuste estadístico en la etapa III de la curva de enfriamiento, se muestra el coeficiente de determinación (r^2) el cual indica la calidad del modelo para replicar los datos.

5.2.4 Tabla de Coeficientes de Transferencia de Calor Globales

Con el ajuste estadístico se obtiene una ecuación que permite conocer el valor del coeficiente U en función de la temperatura. Los coeficientes a y b del ajuste de los datos de todas las curvas de enfriamiento obtenidas se resumen en la tabla 1.

Tabla 1. Coeficientes a y b para el cálculo de U

$U(T) = a + bT^3$					
		$T > T_f$		$T < T_f$	
Metal	Tipo de Convección	a	b	a	b
Aluminio	Natural	7.4857	3.9600×10^{-8}	5.7567	2.3864×10^{-8}
	Forzada	7.9501	3.0018×10^{-8}	14.2909	2.0332×10^{-8}
Cadmio	Natural	5.2076	8.7437×10^{-8}	11.2184	5.6476×10^{-8}
	Forzada	55.7255	2.9362×10^{-8}	36.7354	1.1306×10^{-7}
Plomo	Natural	6.0769	3.9574×10^{-8}	5.8057	3.9380×10^{-8}
	Forzada	14.3629	3.9213×10^{-8}	9.3081	5.8725×10^{-8}
Zinc	Natural	7.0128	2.8769×10^{-8}	5.3444	3.4149×10^{-8}
	Forzada	15.4503	4.4481×10^{-8}	14.4159	4.9298×10^{-8}
Estaño	Natural*	13.5122	5.2863×10^{-8}	7.1251	1.0774×10^{-7}
	Natural**	7.3006	4.2178×10^{-8}	7.4336	4.2437×10^{-8}
	Forzada	31.7795	3.9767×10^{-8}	21.3726	1.1046×10^{-7}

* Enfriada en el Crisol 1

** Enfriada en el Crisol 2

5.2.5 Validación de los Coeficientes Obtenidos

Habiendo obtenido las ecuaciones para el cálculo del coeficiente U , se requiere una validación de las mismas. Para validar las ecuaciones obtenidas se aplica el algoritmo mostrado en la figura 3.5, el cual simula las curvas de enfriamiento haciendo uso del coeficiente U .

Siguiendo el ejemplo mostrado en secciones anteriores, en la siguiente serie de figuras se compara el resultado obtenido de la simulación con la curva obtenida experimentalmente para cada experimento, se puede observar el ajuste obtenido con los modelos de solidificación propuestos.

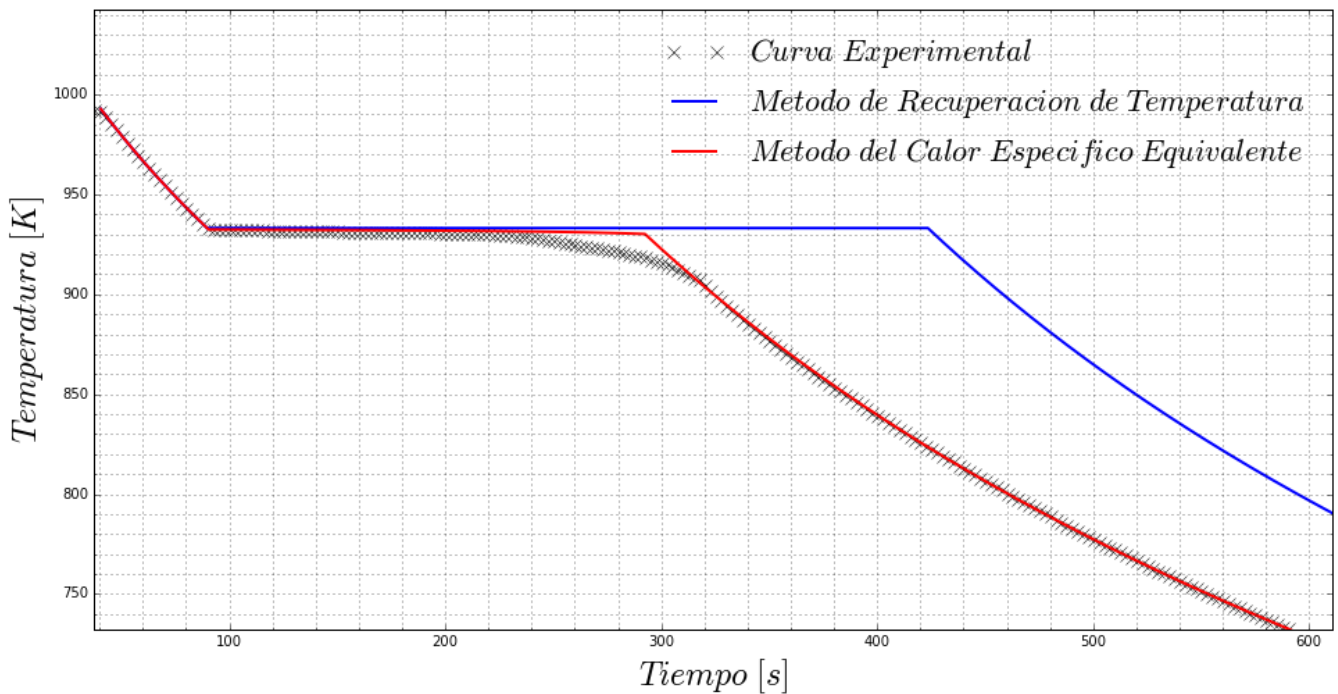


Figura 5.11 Comparación de las curvas de enfriamiento simuladas con la curva experimental para el Aluminio en condiciones de convección natural.

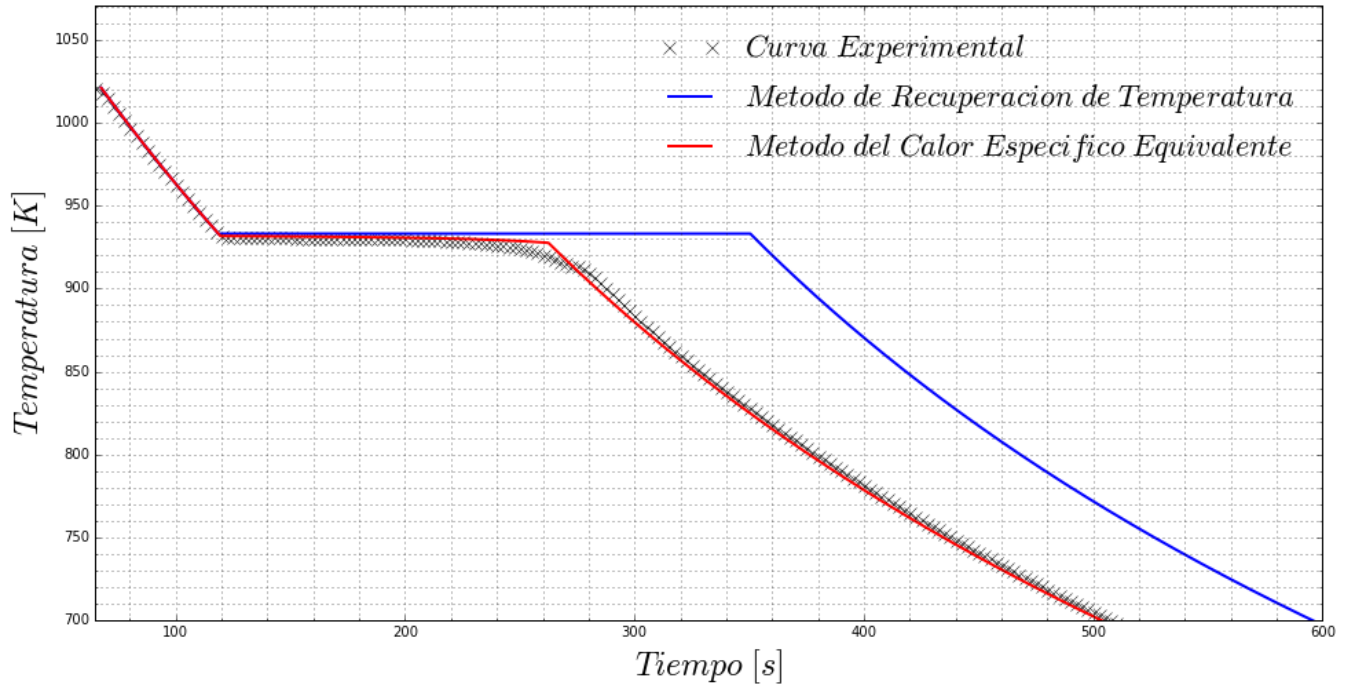


Figura 5.12 Comparación de las curvas de enfriamiento simuladas con la curva experimental para el Aluminio en condiciones de convección forzada.

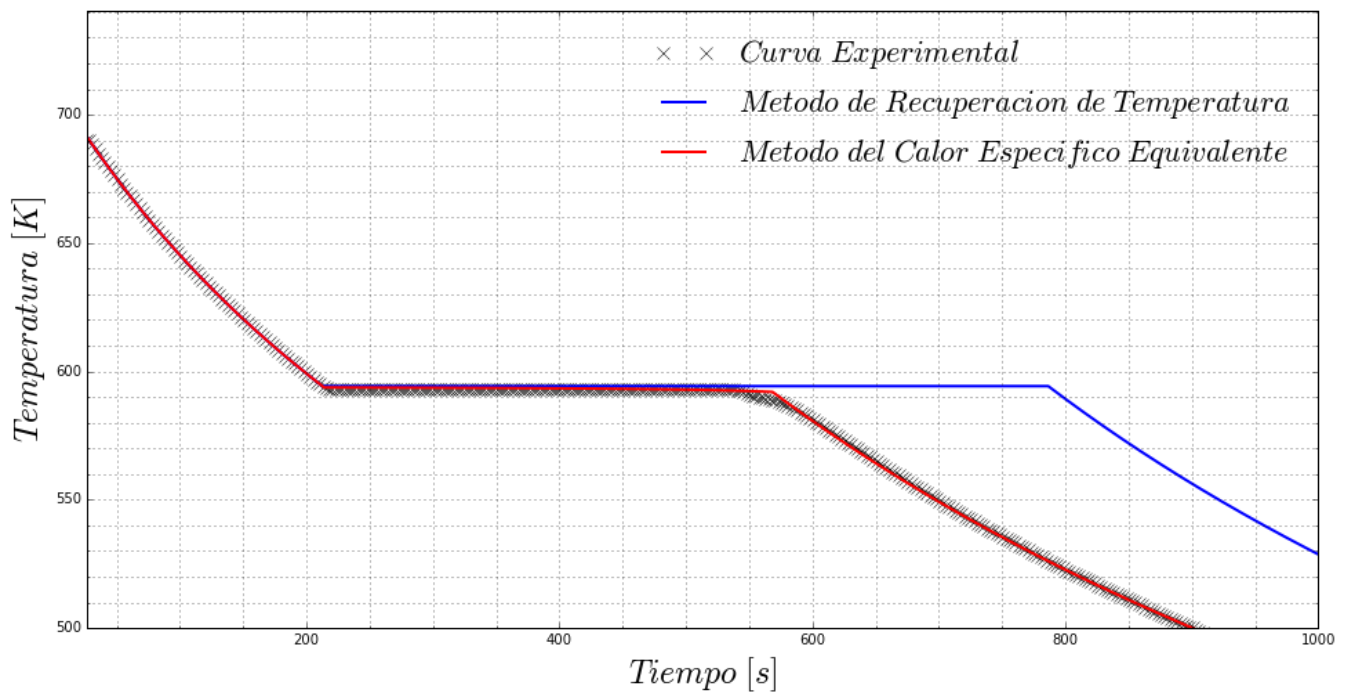


Figura 5.13 Comparación de las curvas de enfriamiento simuladas con la curva experimental para el Cadmio en condiciones de convección natural.

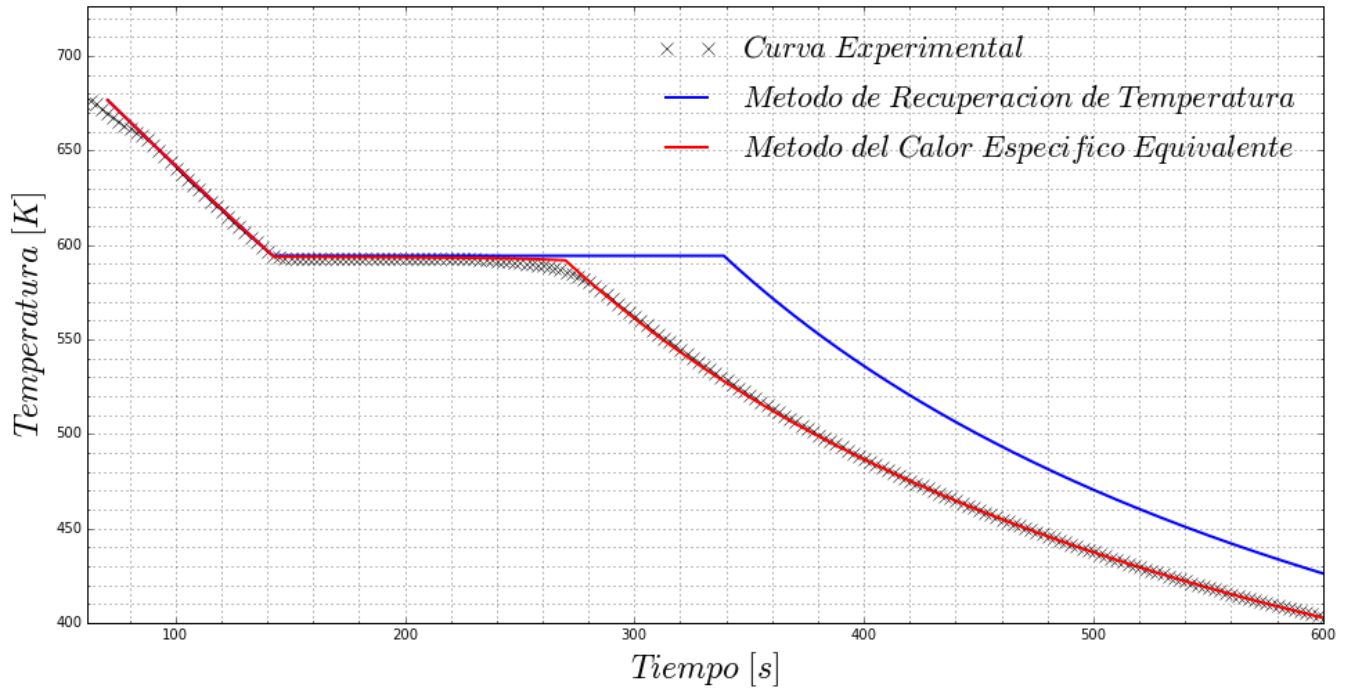


Figura 5.14 Comparación de las curvas de enfriamiento simuladas con la curva experimental para el Cadmio en condiciones de convección forzada.

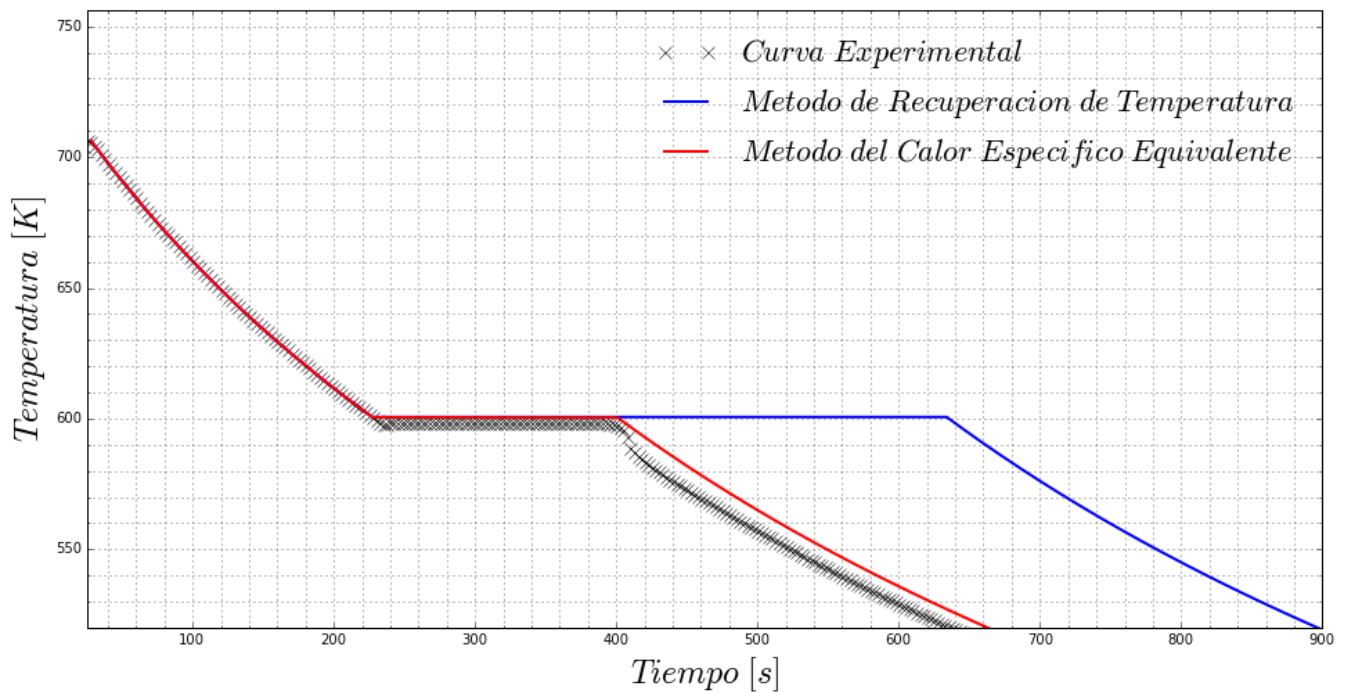


Figura 5.15 Comparación de las curvas de enfriamiento simuladas con la curva experimental para el Plomo en condiciones de convección natural.

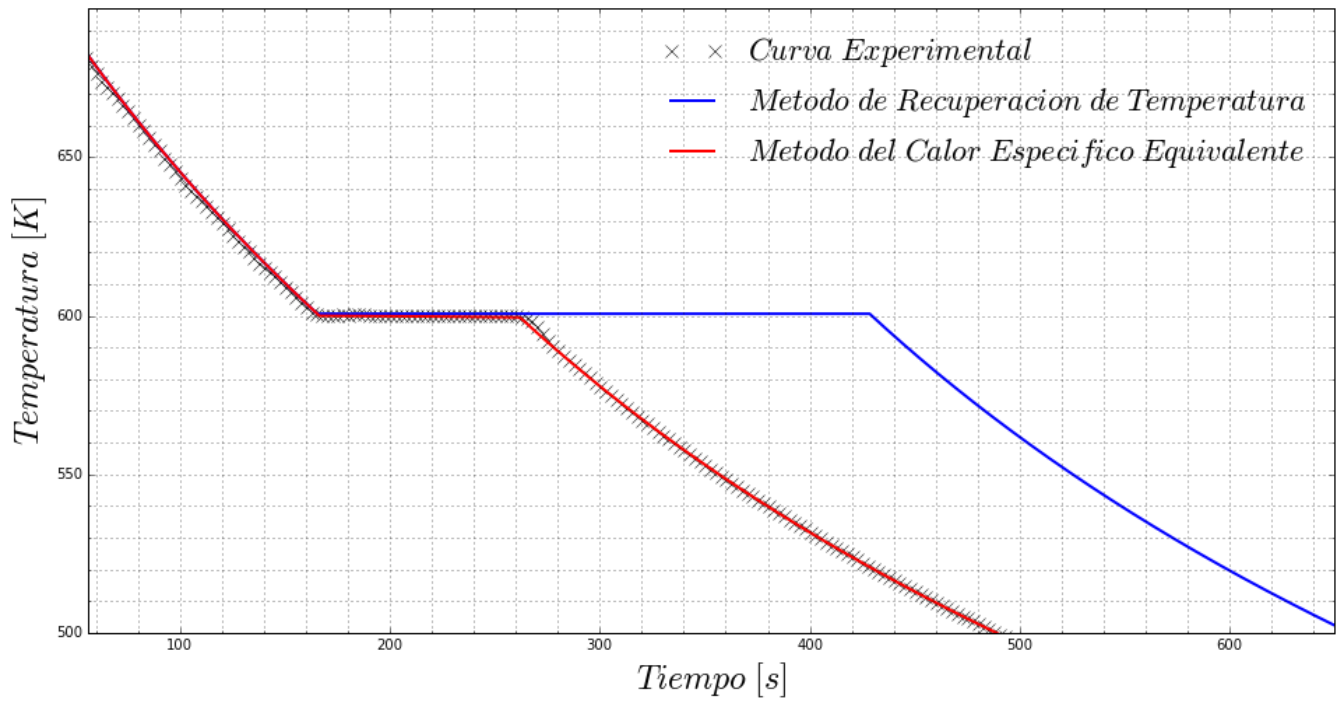


Figura 5.16 Comparación de las curvas de enfriamiento simuladas con la curva experimental para el Plomo en condiciones de convección forzada.

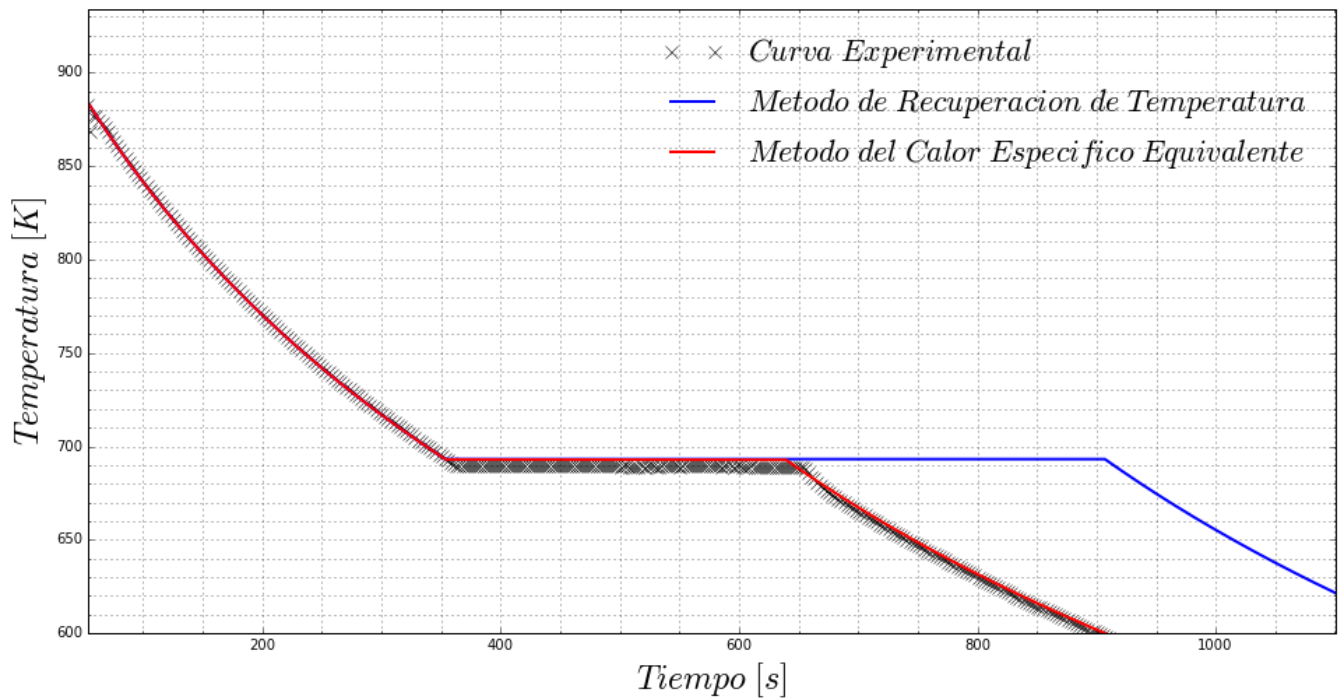


Figura 5.17 Comparación de las curvas de enfriamiento simuladas con la curva experimental para el Zinc en condiciones de convección natural.

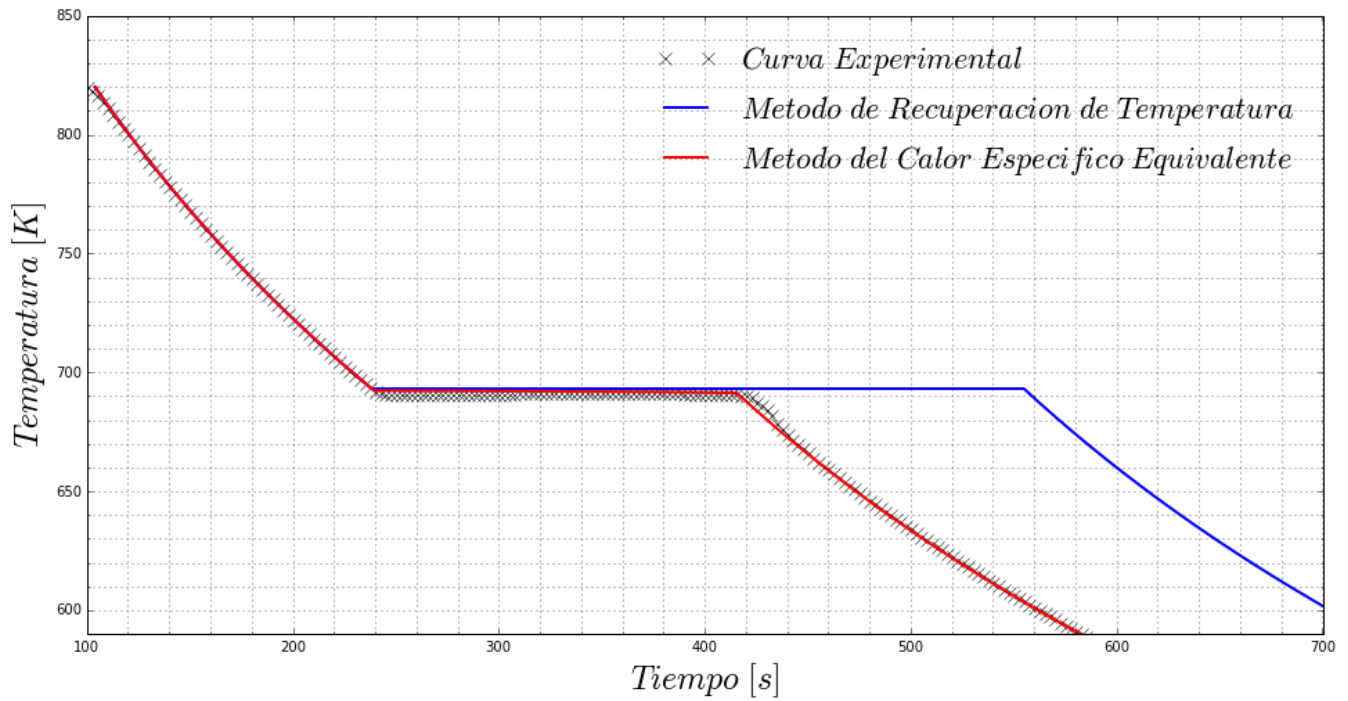


Figura 5.18 Comparación de las curvas de enfriamiento simuladas con la curva experimental para el Zinc en condiciones de convección forzada.

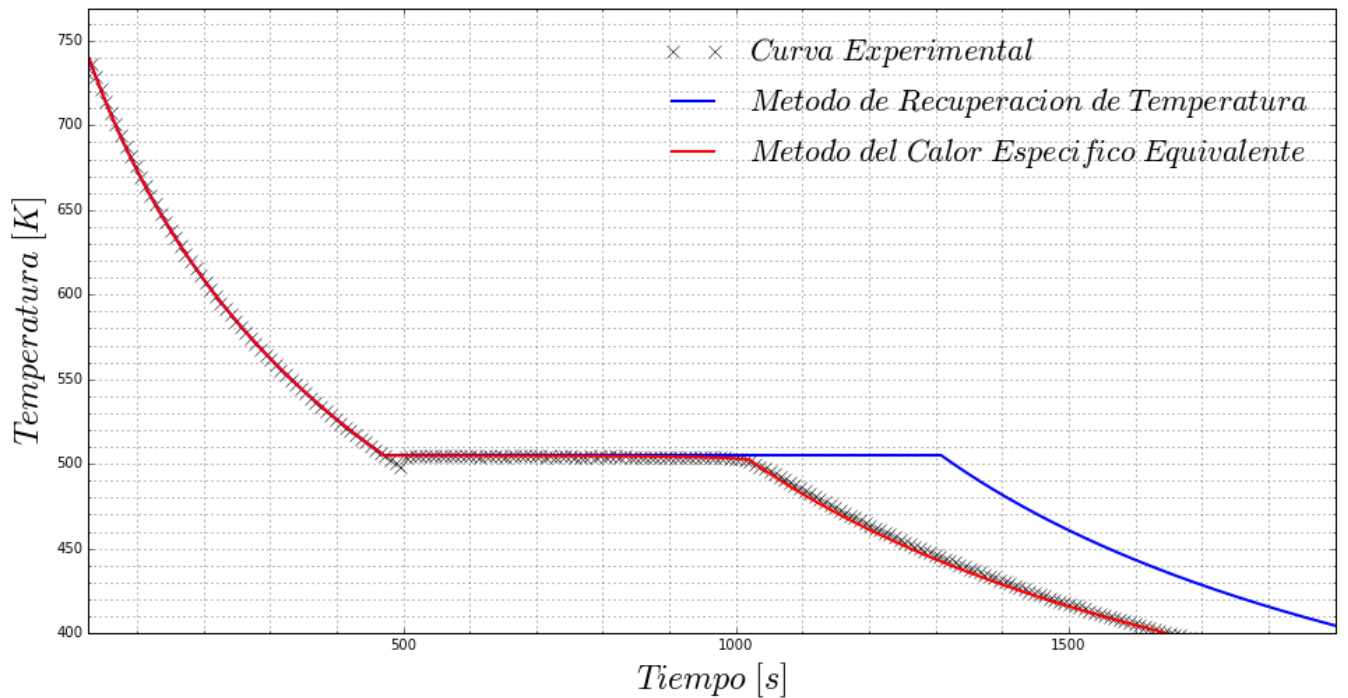


Figura 5.19 Comparación de las curvas de enfriamiento simuladas con la curva experimental para el Estaño en condiciones de convección natural y crisol de pared delgada.

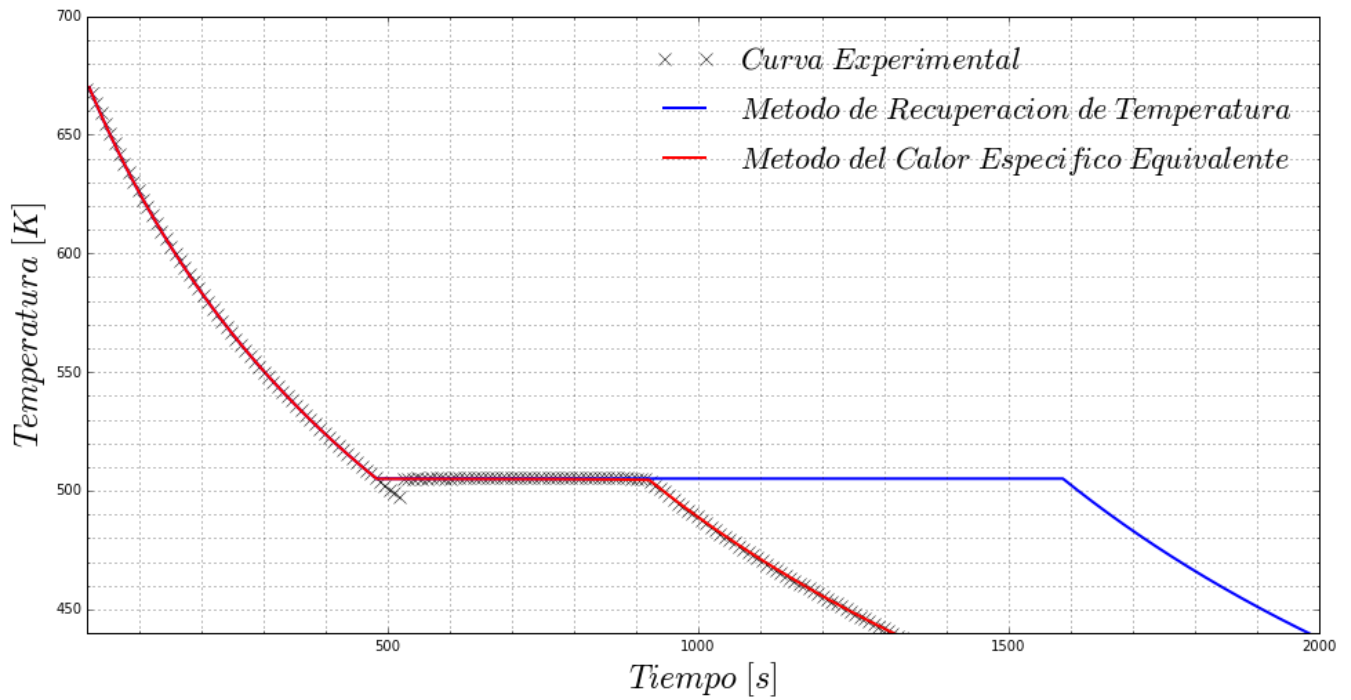


Figura 5.20 Comparación de las curvas de enfriamiento simuladas con la curva experimental para el Estaño en condiciones de convección natural y crisol de pared gruesa.

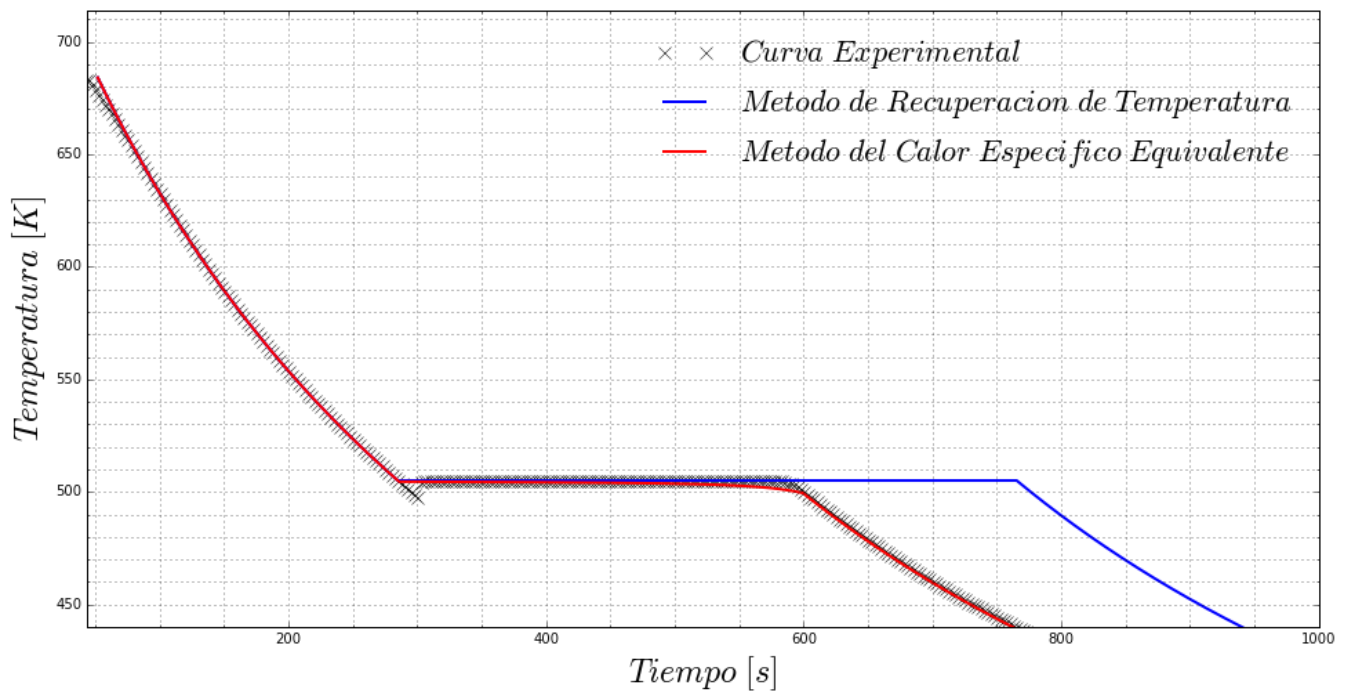


Figura 5.21 Comparación de las curvas de enfriamiento simuladas con la curva experimental para el Estaño en condiciones de convección forzada.

Es claro ver que en ambos modelos, el ajuste en las etapas I y III es bastante bueno, aunque en la etapa II este no lo es tanto para el modelo de recuperación de temperatura. La buena concordancia entre las curvas experimentales con las curvas simuladas con el modelo del calor específico equivalente valida el procedimiento empleado en este trabajo para la determinación de los coeficientes globales de transferencia de calor en los casos experimentales estudiados en este trabajo.

5.3 Discusión de Resultados

Los resultados de los coeficientes U se resumen en la tabla 1, sin embargo, en esta forma no son muy explícitos, a continuación se muestran una serie de figuras con los coeficientes graficados.

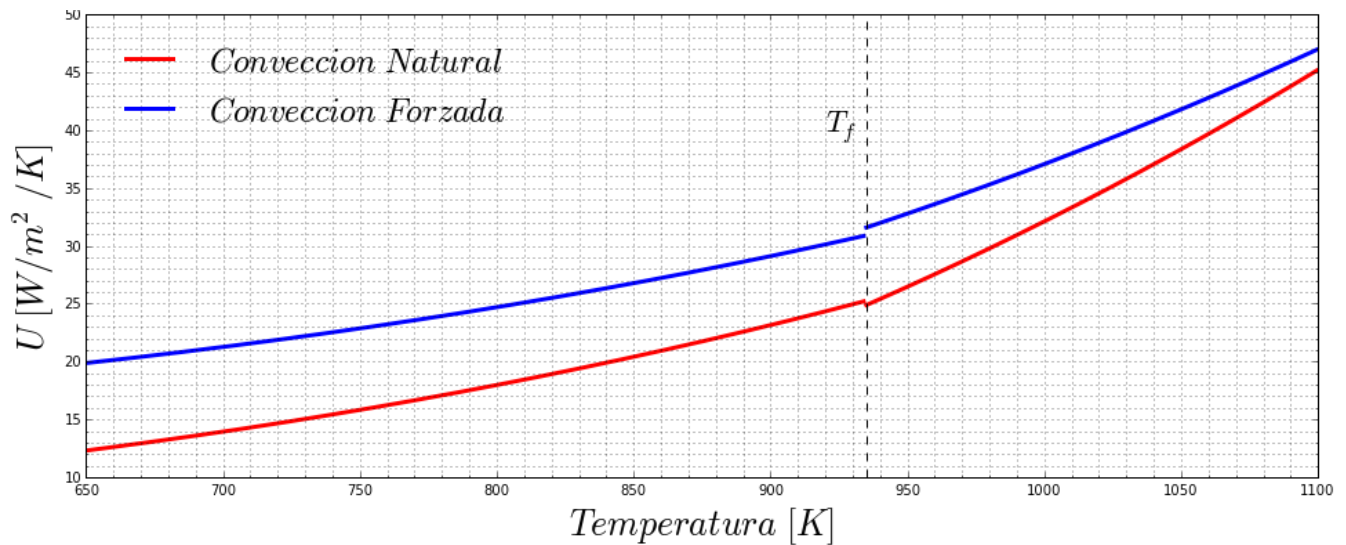


Figura 5.22 Coeficiente U en función de la temperatura del Aluminio

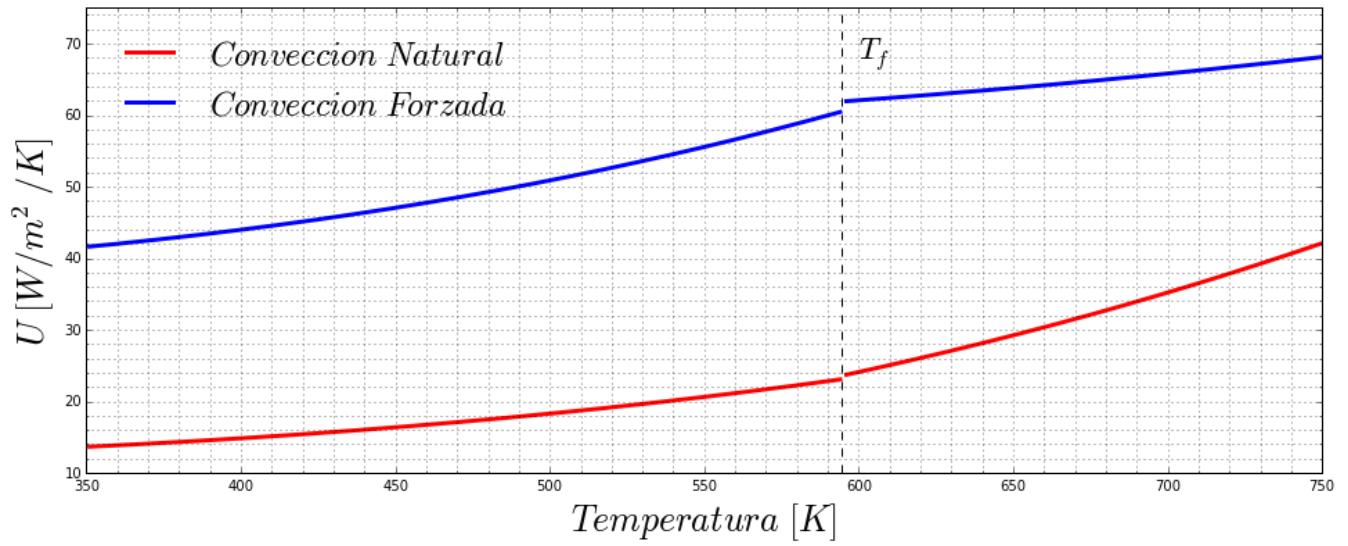


Figura 5.23 Coeficiente U en función de la temperatura del Cadmio

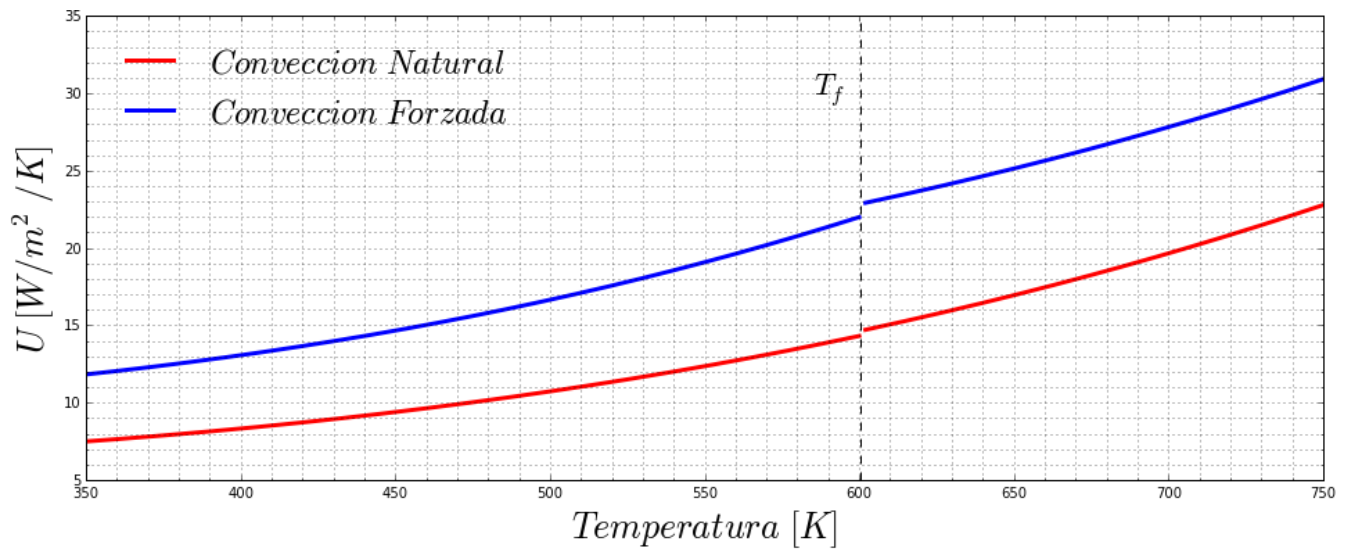


Figura 5.24 Coeficiente U en función de la temperatura del Plomo

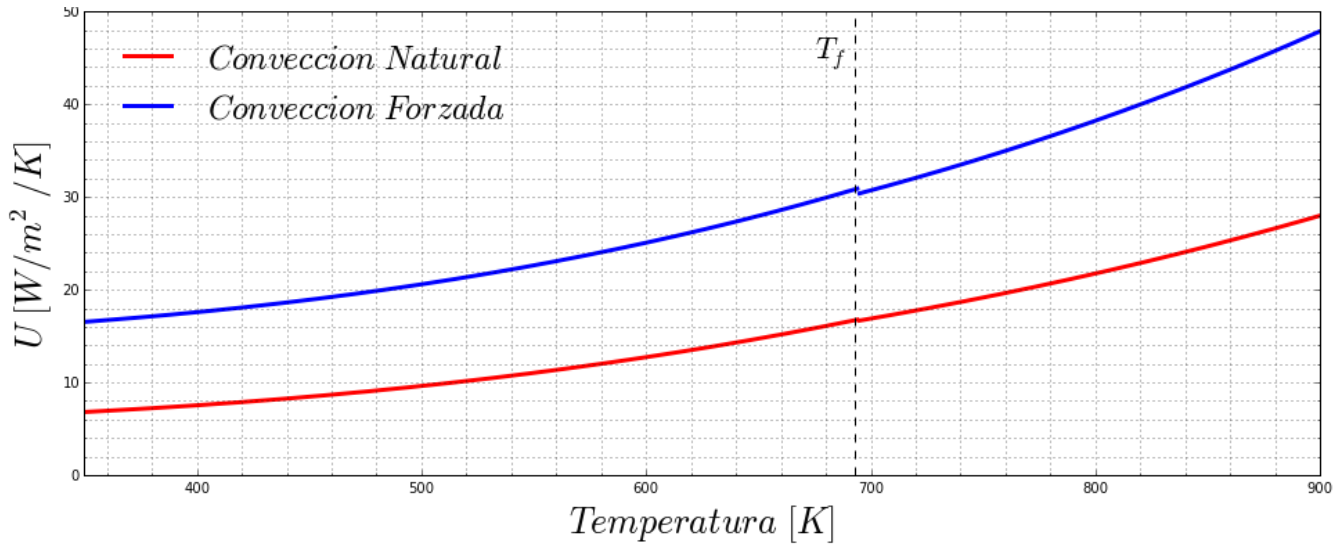


Figura 5.25 Coeficiente U en función de la temperatura del Zinc

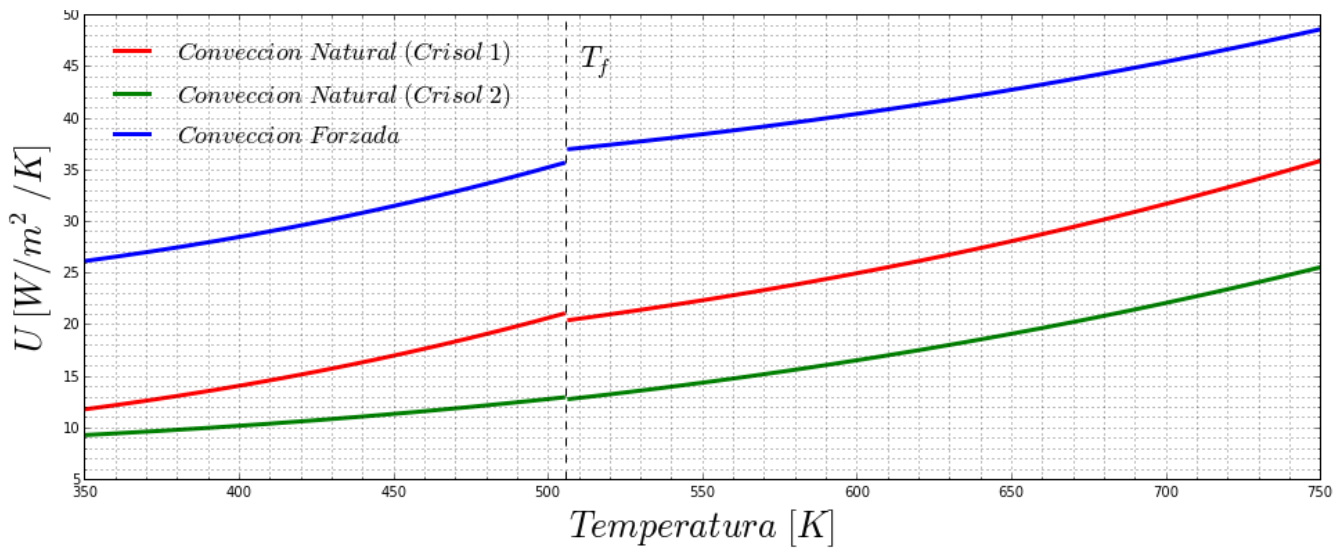


Figura 5.26 Coeficiente U en función de la temperatura del Estaiño

Uno de los objetivos principales de este estudio fue comprobar el efecto de la velocidad de enfriamiento, efecto que, como ve en los gráficos del coeficiente U , tiene una relación directamente proporcional en todos los casos, es decir, al aumentar la velocidad de enfriamiento, aumenta la magnitud del coeficiente de transferencia de calor U tal como se hubiese esperado puesto que los coeficientes de transferencia de calor por convección forzada tienen mayor magnitud que los presentes durante la convección natural.

Respecto al efecto del espesor de pared del crisol se observa que este parámetro tiene un efecto inversamente proporcional, esto es, al aumentar el espesor de pared, el coeficiente U disminuye en magnitud. Esto se debe a que un mayor espesor de pared aumenta la resistencia térmica en el sistema lo que se refleja en la disminución de la transferencia de calor. La disminución del coeficiente U es de alrededor de $9 \text{ W/m}^2\text{K}$, lo que refleja que el espesor de pared del crisol es un factor a tener en cuenta en un proceso de solidificación.

La validación de los coeficientes demostró un excelente ajuste con respecto a la curva experimental, puesto que las pendientes obtenidas con los modelos tuvieron un ajuste con valores de r^2 no menores a 0.9 con el modelo del calor específico equivalente, lo cual es un indicio de la reproducibilidad de los datos por parte del modelo matemático. Sin embargo, es de notar el tiempo local de solidificación, ya que solo el modelo del método del calor específico ajusto de forma correcta con los datos experimentales, estando el modelo de recuperación de temperatura fuera del rango aceptable. Aunque es obvia la ventaja del primer modelo con respecto al segundo, se tiene que tener en cuenta que este modelo requiere de una $C_{A,0}$, además de ciertos parámetros como la K_0 , P_L y P_S , los cuales solo se obtienen de un diagrama de fases eutéctico, el cual no siempre resulta ser fácil de encontrar dependiendo del metal que se estudie.

Se puede concluir que el método aplicado para la obtención de los coeficientes U es muy eficiente dado el buen ajuste con los datos experimentales, además de versátil y puede ser aplicado para otros sistemas con relativa facilidad.

Capítulo 6

Conclusiones

- El coeficiente U es directamente proporcional a la velocidad de enfriamiento del sistema, es decir, aumenta su magnitud al aumentar la velocidad de enfriamiento.
- A su vez, este coeficiente es inversamente proporcional al espesor de pared, el cual al aumentar causa una disminución del coeficiente U .
- El coeficiente de transferencia de calor demostró gran versatilidad a la hora de englobar diferentes mecanismos de transporte de energía y características del sistema como la conductividad de los metales y la resistencia térmica del crisol.
- La validación de los coeficientes demostró un excelente ajuste con respecto a los datos experimentales por lo que se puede concluir que este método puede ser usado para sistemas diferentes.
- Para simular la etapa de la solidificación el método del calor específico demostró un mejor ajuste con respecto al método de recuperación de temperatura, sin embargo, es necesario tener en cuenta todos los parámetros adicionales que se requieren para la aplicación de este método.

Bibliografía

1. Seetharaman, Seshadri. *Fundamentals of Metallurgy*. Woodhead Publishing Limited. Cambridge, USA. 2005. Pp. 109-169, 399-499.
2. Verhoeven, John D. *Fundamentos de Metalurgia Fisica*. Primera Edicion. Limusa. Mexico, D.F. 1987. Pp. 237-300.
3. Smallman, R. E. *Modern Physical Metallurgy*. Octava Edicion. Elsevier. USA. 2014. Pp. 93-117.
4. Reed-Hill, Robert E. *Physical Metallurgy Principles*. Segunda Edicion. Litton Educational Publishing. USA. 1973. Pp. 480-518.
5. Glicksman, Martin Eden. *Principles of Solidification*. Springer. New York, USA. 2011. Pp. 69-97.
6. Stefanescu, Doru Michael. *Science and Engineering of Casting Solidification*. Segunda Edicion. Springer. USA. 2009. Pp. 75-100.
7. Fredriksson, Hasse. *Solidification and Crystallization Processing in Metals and Alloys*. John Wiley & Sons, Ltd. UK. 2012. Pp. 361-422.
8. Stephen H. Davis. *Theory of Solidification*. Cambridge University Press. 2004. Cambridge, UK. Pp. 7-39.
9. Kurz W., Fisher D.J. *Fundamentals of Solidification*. Tercera Edicion. Trans Tech Publications. USA. 1992. Pp. 1-15.
10. Hassen P., Cahn R. W. *Physical Metallurgy, Vol. 1*. Cuarta Edicion. Elsevier. Amsterdam, Netherlands. 1996. Pp. 669-700.
11. Cantor, B. *Solidification and Casting*. Primera Edicion. IOP Publishing Ltd. UK. 2003. Pp. 77-87.
12. S Oxley, PN Quested and KC Mills: *Proc. Amer. Vacuum Soc. Conf.*, Santa Fe, USA. Amer. Vac. Soc. (1999).
13. Kubaschewski, O. *Metallurgical Thermochemistry*. Quinta Edicion. Pergamon Press Ltd. New York, USA. 1979. Pp. 268-339.
14. Sidebotham, George. *Heat Transfer Modelling*. Springer. NY, USA. 2015. Pp. 31-50.
15. Hong, Chun-Pyu. *Computer Modelling of Heat and Fluid Flow in Materials Processing*. IoP Publishing Ltd. UK. 2004. Pp. 111-132.