

## **IMPLEMENTACIÓN COMPUTACIONAL DE UN MODELO MATEMÁTICO BIFÁSICO, PARA PREDECIR LA TRANSFERENCIA DE CALOR, MATERIA Y MOMENTUM, DURANTE LA SOLIDIFICACIÓN DE ALEACIONES BINARIAS.**

**Arnoldo A. Badillo y Nelson O. Moraga**

Departamento de Ingeniería Mecánica, Universidad de Santiago de Chile  
Avenida Libertador Bernardo O'Higgins 3363, Santiago, Chile. TE: 56-(2) 6821691  
e-mail: nmoraga@lauca.usach.cl

**Palabras clave:** Solidificación, Métodos Numéricos, Fenómenos de Transporte.

**Resumen.** *En el presente trabajo, se estudia la solidificación de una aleación binaria de Fe-C, considerando la transferencia de especies tanto en el líquido como en la zona pastosa. Se ha implementado un modelo matemático bifásico, en el cual cada fase se trata separadamente y las interacciones entre éstas, se consideran explícitamente. Las ecuaciones de transporte, se obtienen utilizando la técnica del promedio volumétrico y el método numérico empleado para su solución es Volúmenes Finitos y el algoritmo SIMPLER para el acoplamiento de todas las ecuaciones. La fracción de sólido se calcula mediante una combinación de las ecuaciones discretizadas de energía, concentración y la línea liquidus del diagrama de fases binario. Los resultados generados incluyen la variación en el tiempo de las distribuciones de temperatura, concentración, velocidades y fracción de sólido.*

## 1 INTRODUCCIÓN

La transferencia de calor acompañada de cambios de fases, es de gran importancia en muchas aplicaciones industriales como por ejemplo la fabricación de piezas coladas, los tratamientos térmicos en los aceros, la congelación de alimentos, etcétera. Mediante la formulación de modelos matemáticos y métodos numéricos eficientes, es posible mejorar la calidad de los productos, disminuir los costos de experimentación y proporcionar herramientas más versátiles para la solución de problemas en esta área.

En orden de predecir la composición de un metal solidificado, es importante incluir apropiadamente los fenómenos en una escala microscópica para modelar el transporte de especies, momentum y calor en una escala macroscópica. En este artículo se presenta el modelo de solidificación desarrollado por Ni y Beckermann<sup>1</sup>, implementado computacionalmente para simular la solidificación de una aleación binaria de hierro carbono, el cual permite acoplar íntimamente los procesos que ocurren en escalas micro y macroscópicas.

Debido a la presencia de estructuras interfaciales complejas, que caracterizan la solidificación de aleaciones, usualmente es imposible resolver las ecuaciones de conservación en escalas micro y macroscópicas simultáneamente. Sin embargo, se emplean modelos macroscópicos de fenómenos de transporte, los que pueden ser derivados promediando las ecuaciones de conservación microscópicas sobre volúmenes de control de tamaño finito, que contienen líquido y sólido conjuntamente. Este volumen, mostrado en la figura 1, es mucho más pequeño que el sistema y más grande comparado con el tamaño característico de las estructuras interfaciales. Las ecuaciones macroscópicas resultantes para cada fase, necesitan ser complementadas con relaciones constitutivas que describen las interacciones de una fase consigo misma y las otras fases. Hills<sup>2</sup>, Prandtl y Dawson<sup>3</sup>, y Bennon e Incropera<sup>4</sup> utilizaron una teoría de mezcla para postular ecuaciones macroscópicas sin referencia a las ecuaciones microscópicas. Aunque puede ser posible la deducción de los términos en las ecuaciones macroscópicas sin el uso de promedios, existen varias ventajas del uso de promedios, las cuales son discutidas por Drew<sup>5</sup>. Esencialmente, el promedio de una variable  $\psi$  sobre un volumen (o promedio volumétrico de  $\psi$ ), muestra como se forman diversos términos en las ecuaciones macroscópicas y como las variables macroscópicas resultantes son relacionadas con las microscópicas. Esto entrega un buen conocimiento de la formulación de las relaciones constitutivas y la clave para incorporar la evolución del sólido y los fenómenos de transporte en escalas microscópicas dentro de un modelo macroscópico. Beckermann y Viskanta<sup>6</sup> tomaron esta aproximación para derivar un modelo de solidificación de crecimiento dendrítico columnar de mezclas binarias. Estos procedimientos de promedios volumétricos y la forma que adoptan las ecuaciones resultantes, están bien establecidos y han sido utilizados en la modelación de una gran variedad de sistemas multifases.

Viskanta y Beckermann<sup>7</sup>, realizaron una revisión de diversos modelos matemáticos, donde la mayoría asume la velocidad del sólido igual a cero o se postula alguna relación adecuada entre las velocidades del líquido y del sólido, resolviendo una ecuación muy elemental para la conservación del momentum. La incorporación de la velocidad del sólido puede adquirir relevancia si se considera, por ejemplo, dendritas equiaxiales flotantes o

asentadas, durante los instantes iniciales de la solidificación. Además, en algunos procesos de solidificación (rheocasting y solidificación rápida de sprays), el sólido sufre un movimiento forzado. Una dificultad en la modelación de sólidos en movimiento, radica en que la fracción de sólido así como también parámetros geométricos asociados a la microestructura, son transportados con el sólido. Los modelos para la fracción de sólido que incluyen el movimiento de sólidos, carecen de bases teóricas consistentes. Por otro lado, muchos modelos macroscópicos asumen un completo equilibrio termodinámico y químico entre todas las fases dentro de un volumen de control. Un verdadero modelo de solidificación con dos temperaturas (o entalpías) y dos concentraciones de especies, fue desarrollado por Ni y Beckermann<sup>1</sup>, donde se presentan claramente las bases físicas y matemáticas que sustentan el modelo. La suposición de equilibrio, generalmente no es válida para la solidificación de mezclas, debido a que usualmente existen fuertes gradientes de concentración en el sólido en escalas microscópicas. Rappaz<sup>8</sup> revisó un número de modelos micro-macroscópicos de solidificación dendrítica y eutéctica, equiaxial y columnar de aleaciones. Esos modelos incluyen la nucleación y diversos subenfriamientos mediante la introducción de modelos especiales para la fracción de sólido.

En el último tiempo, se han conducido diversas investigaciones para entender los procesos que conducen la formación de defectos en la solidificación de aleaciones. El desarrollo de algoritmos numéricos eficientes para resolver las ecuaciones y la generación de modelos matemáticos más precisos, para estudiar los fenómenos de transporte que ocurren durante la solidificación, son el objetivo principal de estos trabajos. Las simulaciones numéricas han mostrado la habilidad de los modelos macroscópicos de solidificación, para predecir los efectos de la convección en la zona pastosa y el líquido, el desarrollo de un frente irregular de solidificación, refusiones locales del sólido, flujo de chimeneas en la zona pastosa y el establecimiento de patrones de macrosegregación de aleaciones binarias.

La mayoría de los modelos macroscópicos de solidificación de aleaciones se han enfocado al estudio de sistemas binarios, debido a que éstos involucran relativamente pocas fases, pero que aún exhiben fenómenos físicos que pueden ser esperados en sistemas más complejos. El estudio de los sistemas binarios, ha permitido un mejor entendimiento de los fenómenos involucrados en la solidificación de aleaciones, pero evidentemente las aleaciones tecnológicamente y comercialmente importantes (aceros y super aleaciones base níquel), son sistemas multicomponentes, por lo que se hace necesario la utilización de modelos que puedan considerar la conservación de varias especies. Un modelo de estas características fue desarrollado por Schneider y Beckermann<sup>9</sup>, donde se estudia la solidificación de un acero con nueve elementos aleantes. En un gran número de aleaciones multicomponentes, la influencia de múltiples especies sobre los fenómenos de transporte, depende estrechamente de tres efectos acoplados: a) las diferencias en el coeficiente de expansión solutal para los elementos en la fase líquida; b) la diferencia en los coeficientes de partición para los elementos, así como también los efectos de varios elementos sobre la línea liquidus; y c) las diferencias en las tasas de difusión de los elementos en la fase sólida. Debido a la diferencia de los coeficientes de partición y las difusividades de los elementos en el sólido, la microsegregación de cada especie en el sólido no será igual. Esas diferencias en la microsegregación, conducirán a diferencias en la distribución de los elementos aleantes en el líquido y en la zona pastosa.

Además las diferencias en los coeficientes de expansión solutal de los elementos en el líquido, influirá sobre la fuerza boyante de distinta manera. Considerando estos factores, es claro que la distribución final de una especie no dependerá sólo sus propiedades, sino que también de las propiedades de los otros elementos presentes en la aleación.

El objetivo de este trabajo es implementar computacionalmente el modelo de Ni y Beckermann que combina formulaciones micro y macroscópicas para describir procesos de solidificación. Se estudia la transferencia de especies, tanto en la fase líquida como en la zona pastosa correspondiente a una aleación de Fe con 0.8% de C. Los resultados transiente se generaron con el método de Volúmenes Finitos y el algoritmo SIMPLER.

## 2 DESCRIPCIÓN DEL MODELO

Una detallada descripción de la derivación del modelo puede ser encontrada en Ni y Beckermann<sup>1</sup> por lo tanto, sólo se presentará una breve discusión del modelo. En todas las ecuaciones,  $\langle \Psi_k \rangle^k$  indica el promedio volumétrico de una cantidad  $\Psi$  de la fase  $k$ , y  $\bar{\Psi}_{kj}$  indica el promedio de una cantidad  $\Psi$  de la fase  $k$  sobre el área interfacial entre las fases  $k$  y  $j$  en el volumen de control.

### 2.1 Suposiciones

- 1) La velocidad de la fase sólida es relativa al molde, el cual es estacionario, por tanto:

$$\langle \mathbf{v}_s \rangle^s = 0 \quad (1)$$

- 2) El sólido y el líquido están en equilibrio térmico, dentro de cada volumen de control, es decir,

$$\langle T_s \rangle^s = \langle T_l \rangle^l = T \quad (2)$$

- 3) El líquido dentro de un volumen de control, es considerado solutalmente bien mezclado, tal que el promedio interfacial para el líquido y el promedio volumétrico de la concentración en el líquido es igual (gradiente de concentración igual a cero en el líquido),

$$\langle C_l \rangle^l = \bar{C}_{ls} \quad (3)$$

- 4) La difusión microscópica del soluto en el sólido es modelada asumiendo un modelo de placa unidimensional para los brazos dendríticos y asumiendo una distribución parabólica de soluto en el sólido.
- 5) Se consideran tasas macroscópicas finitas para la difusión de especies en el líquido, mientras que la difusión en el sólido se considera despreciable.
- 6) Se asume equilibrio termodinámico en la interfase sólido-líquido.
- 7) Las entalpías de cada fase, sólo se consideran variables con la temperatura.
- 8) La gravedad es la única fuerza de cuerpo.

- 9) Se emplea la aproximación de Boussinesq para simular la fuerza de empuje y se asume un comportamiento Newtoniano del fluido, por lo tanto los esfuerzos de corte son proporcionales a las velocidades de deformación.
- 10) Los esfuerzos interfaciales disipativos en la matriz porosa de dendritas columnares es modelada usando una permeabilidad en la zona pastosa en analogía con la ley de Darcy.
- 11) La naturaleza direccional de las dendritas, causa anisotropía en la permeabilidad. En nuestro caso se asume que los brazos dendríticos principales están alineados con el flujo de calor.

## 2.2 Difusión microscópica de especies en el sólido.

En la ecuación macroscópica de conservación de especies en el sólido la transferencia de soluto en la interfase sólido-líquido, debido a gradientes microscópicos de concentración dentro del sólido, se modela como el producto del área interfacial para la concentración ( $S_s$ ) y un valor medio del flujo interfacial del elemento aleante. Este flujo es proporcional a la diferencia entre el promedio en la interfase de la concentración del sólido  $\bar{C}_{sl}$  y el promedio volumétrico de la concentración de soluto en el sólido  $\langle C_s \rangle^s$ , donde la constante de proporcionalidad se calcula considerando una distancia de difusión ( $l_s$ ), la densidad del sólido y el coeficiente de difusión másico del soluto en el sólido. La distancia de difusión y el área interfacial, son en general, funciones complejas que dependen de las condiciones dentro del volumen de control, la microestructura sólida y la fracción de sólido. Siguiendo a Wang y Beckerman, donde se asume una geometría de placas unidimensional para los brazos dendríticos secundarios y una distribución de concentración localmente parabólica en el sólido, es posible relacionar el área interfacial para la concentración y la longitud de difusión de especies con la fracción de sólido como

$$S_s = \frac{2}{d_2} \quad (4)$$

y

$$l_s = \frac{\varepsilon_s d_2}{6} \quad (5)$$

donde  $\varepsilon_s$  es la fracción de sólido y  $d_2$  es el espaciamiento de brazos dendríticos secundarios (SDAS Secondary Dendrite Arm Spacing). Estas relaciones son fáciles de obtener considerando una situación unidimensional para la difusión entre los brazos dendríticos secundarios (Figura 1). Por definición, el área interfacial para la concentración se define como

$$S_s = \frac{A_{kj}}{V_0} \quad (6)$$

donde  $A_{kj}$  corresponde al área interfacial entre las fases  $k$  y  $j$ , y  $V_0$  corresponde al volumen donde se está realizando el cálculo (Figura 2). En la figura, se puede distinguir claramente que  $A_{kj} = 1$  y  $V_0 = 1 \times d_2/2 = d_2/2$ .

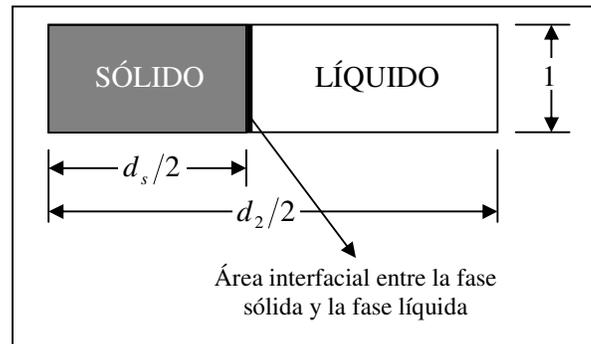


Figura 1. Situación unidimensional de difusión entre los brazos dendríticos secundarios.

Para obtener la distancia de difusión  $l_s$ , es necesario considerar un perfil parabólico y realizar el promedio volumétrico de la concentración en el sólido  $\langle C_s \rangle^s$ . La parábola que describe la concentración en el sólido está dada por  $C_s = Ax^2 + Bx + C$ , pero como la concentración es simétrica respecto del lado izquierdo, se tiene que  $dC_s/dx|_{x=0} = 0$ . Además  $C_s = C_0k$  en  $x = 0$  y  $C_s = \bar{C}_{sl}$  en  $x = d_s/2$ , por lo que la concentración de soluto en el sólido es:

$$C_s = \left( \frac{\bar{C}_{sl} - C_0k}{(d_s/2)^2} \right) x^2 + C_0k \quad (7)$$

luego el promedio volumétrico de la concentración en el sólido queda definido por:

$$\langle C_s \rangle^s = \frac{\int_0^{d_s/2} C_s dx}{\int_0^{d_s/2} dx} = \frac{\bar{C}_{sl} - C_0k}{3} + C_0k \quad (8)$$

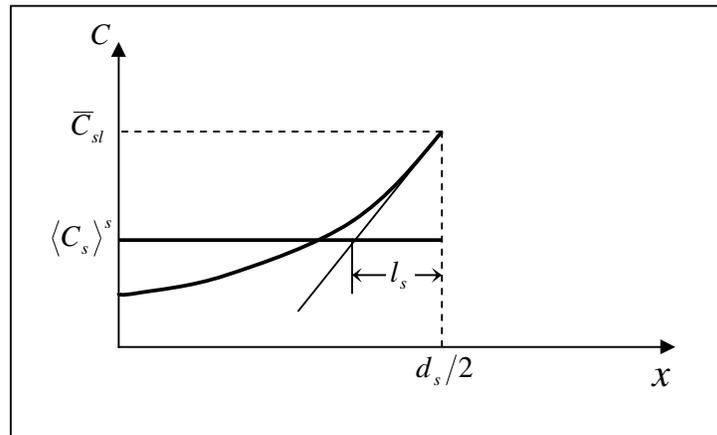


Figura 2. Perfil parabólico para la concentración de soluto en los brazos dendríticos secundarios.

El gradiente de concentración en la interfase sólido-líquido es aproximado por:

$$\left. \frac{dC_s}{dx} \right|_{sl} \approx \frac{\bar{C}_{sl} - \langle C_s \rangle^s}{l_s} \quad (9)$$

por tanto se define

$$l_s = \frac{\bar{C}_{sl} - \langle C_s \rangle^s}{\left. \frac{dC_s}{dx} \right|_{sl}} \quad (10)$$

substituyendo las ecuaciones (8) y (9) en (10), se obtiene finalmente

$$l_s = \frac{d_s}{6} \quad (11)$$

pero

$$\varepsilon_s = \frac{d_2}{d_s} \quad (12)$$

reemplazando (12) en (11), se obtiene (5)

### 2.3 Relaciones Termodinámicas

Las únicas relaciones termodinámicas empleadas, son extraídas directamente del diagrama de fases para el sistema Fe-C. Estas son la línea liquidus que se aproxima mediante un comportamiento lineal:

$$T_L = T_f + \frac{dT}{dC} C \quad (13)$$

Asumiendo la condición de líquido perfectamente mezclado, el coeficiente de partición  $\kappa$  se define como:

$$\kappa = \frac{\bar{C}_{sl}}{\langle C_l \rangle^l} \quad (14)$$

### 3. MODELO MATEMÁTICO

**3.1 Ecuaciones.** Las ecuaciones básicas utilizadas son:

Conservación de Masa

$$\frac{\partial}{\partial t}(\varepsilon_l \rho_l) + \nabla \cdot (\varepsilon_l \rho_l \langle \mathbf{v}_l \rangle^l) = -\frac{\partial}{\partial t}(\varepsilon_s \rho_s) \quad (15)$$

Conservación de Especies en el Líquido

$$\begin{aligned} \varepsilon_l \rho_l \frac{\partial \langle C_l \rangle^l}{\partial t} + \varepsilon_l \rho_l \langle \mathbf{v}_l \rangle^l \cdot \nabla \langle C_l \rangle^l = \nabla \cdot (\varepsilon_l \rho_l D_l \nabla \langle C_l \rangle^l) - \varepsilon_s \rho_s \frac{\partial \langle C_s \rangle^s}{\partial t} + \\ \left[ \langle C_l \rangle^l - \langle C_s \rangle^s \right] \frac{\partial}{\partial t}(\varepsilon_s \rho_s) \end{aligned} \quad (16)$$

Conservación de Especies en el Sólido

$$\varepsilon_s \rho_s \frac{\partial \langle C_s \rangle^s}{\partial t} = \left[ \bar{C}_{sl} - \langle C_s \rangle^s \right] \left[ \frac{\partial}{\partial t}(\varepsilon_s \rho_s) + S_s \frac{\rho_s D_s}{l_s} \right] \quad (17)$$

Conservación de Energía

$$\begin{aligned} \varepsilon_l \rho_l \frac{d \langle h_l \rangle^l}{dT} \frac{\partial T}{\partial t} + \varepsilon_l \rho_l \frac{d \langle h_l \rangle^l}{dT} \langle \mathbf{v}_l \rangle^l \cdot \nabla T = \nabla \cdot \{(\varepsilon_l k_l + \varepsilon_s k_s) \nabla T\} - \varepsilon_s \rho_s \frac{d \langle h_l \rangle^l}{dT} \frac{\partial T}{\partial t} + \\ \left[ \langle h_l \rangle^l - \langle h_s \rangle^s \right] \frac{\partial}{\partial t}(\varepsilon_s \rho_s) \end{aligned} \quad (18)$$

Conservación de Momentum

$$\begin{aligned} \varepsilon_l \rho_l \frac{\partial \langle \mathbf{v}_l \rangle^l}{\partial t} + \varepsilon_l \rho_l \langle \mathbf{v}_l \rangle^l \cdot \nabla \langle \mathbf{v}_l \rangle^l = & -\varepsilon_l \nabla p + \nabla \cdot (\varepsilon_l \rho_l \mathbf{v}_l \nabla \langle \mathbf{v}_l \rangle^l) + \\ \nabla \cdot \left\{ \varepsilon_l \rho_l \mathbf{v}_l \left[ \nabla \langle \mathbf{v}_l \rangle^l \right] + \rho_l \mathbf{v}_l \left[ \langle \mathbf{v}_l \rangle^l \nabla \varepsilon_l + \nabla \varepsilon_l \langle \mathbf{v}_l \rangle^l \right] \right\} - \varepsilon_s \rho_s \frac{\partial \langle C_s \rangle^s}{\partial t} + & (19) \\ \left[ \langle C_l \rangle^l - \langle C_s \rangle^s \right] \frac{\partial}{\partial t} (\varepsilon_s \rho_s) - \varepsilon_l^2 \rho_l \mathbf{v}_l \mathbf{K}^{(2)-1} \langle \mathbf{v}_l \rangle^l + \varepsilon_l \rho_l g \left[ \beta_T (T - T_{ref}) + \beta \left( \langle C_l \rangle^l - C_{ref} \right) \right] \end{aligned}$$

### 3.2 Propiedades de la aleación

Tabla 1: Propiedades termofísicas de la aleación

Propiedad	Líquido	Sólido
Densidad $\rho$ $kg/m^3$	7300	7300
Expansión térmica $\beta_T$ $1/K$	$2.0 \times 10^{-4}$	-
Expansión solutal $\beta_C$ $1/\% peso$	$1.1 \times 10^{-2}$	-
Difusividad solutal $D$ $m^2/s$	$2.0 \times 10^{-9}$	$5.6 \times 10^{-10}$
Viscosidad $\mu$ $kg/(ms)$	$6.0 \times 10^{-4}$	-
Calor específico $\partial \langle h_k \rangle^k / \partial T$ $J/(kgK)$	700	700
Conductividad térmica $k$ $W/(mK)$	30	27

Espaciamiento dendrítico primario  $d_1 = 350 \mu m$

Espaciamiento dendrítico secundario  $d_2 = 75 \mu m$

Permeabilidad paralela a los brazos dendríticos primarios

$$K_{\xi\xi} = \begin{cases} \left[ 4.53 \times 10^{-4} + 4.02 \times 10^{-6} (\varepsilon_l + 0.1)^{-5} \right] \frac{d_1^2 \varepsilon_l^3}{1 - \varepsilon_l} & \varepsilon_l < 0.7 \\ 0.07425 d_1^2 \left[ -\ln(1 - \varepsilon_l) - 1.487 + 2(1 - \varepsilon_l) - 0.5(1 - \varepsilon_l)^2 \right] & \varepsilon_l \geq 0.7 \end{cases} \quad (20)$$

Permeabilidad paralela a los brazos dendríticos secundarios

$$K_{\eta\eta} = \begin{cases} \left[ 1.73 \times 10^{-3} \left( \frac{d_1}{d_2} \right)^{1.09} \right] \frac{d_1^3 \varepsilon_l^3}{1 - \varepsilon_l^{0.749}} & \varepsilon_l < 0.7 \\ 0.03979 d_1^2 \left[ -\ln(1 - \varepsilon_l) - 1.476 + 2(1 - \varepsilon_l) - 1.774(1 - \varepsilon_l)^2 + 4.076(1 - \varepsilon_l)^3 \right] & \varepsilon_l \geq 0.7 \end{cases} \quad (21)$$

### 3.3 Condiciones de Borde e Inicial

La condición inicial considera velocidad nula y una distribución uniforme de temperatura y concentración de 1813 K y 0.8% peso respectivamente. Las condiciones de borde para la velocidad son de no deslizamiento y derivada normal nula para la concentración. Los bordes están aislados térmicamente, excepto en el lado izquierdo, donde el coeficiente convectivo tiene un valor de  $150 \text{ W}/(\text{m}^2 \text{ K})$  y la temperatura ambiente es de 293.15 K

## 4 SITUACIÓN FÍSICA

Se estudia la solidificación de una aleación binaria de Fe-0.8C %peso, en un molde de paredes infinitamente delgadas y de geometría rectangular. El molde está aislado térmicamente en todas sus caras, excepto en el lado izquierdo, donde la transferencia de calor es por convección al medio exterior. En la figura 3, se presentan el coeficiente convectivo, la temperatura ambiente, las dimensiones del molde y el perfil de concentraciones entre los brazos dendríticos secundarios, tanto en el sólido como en el líquido interdendrítico.

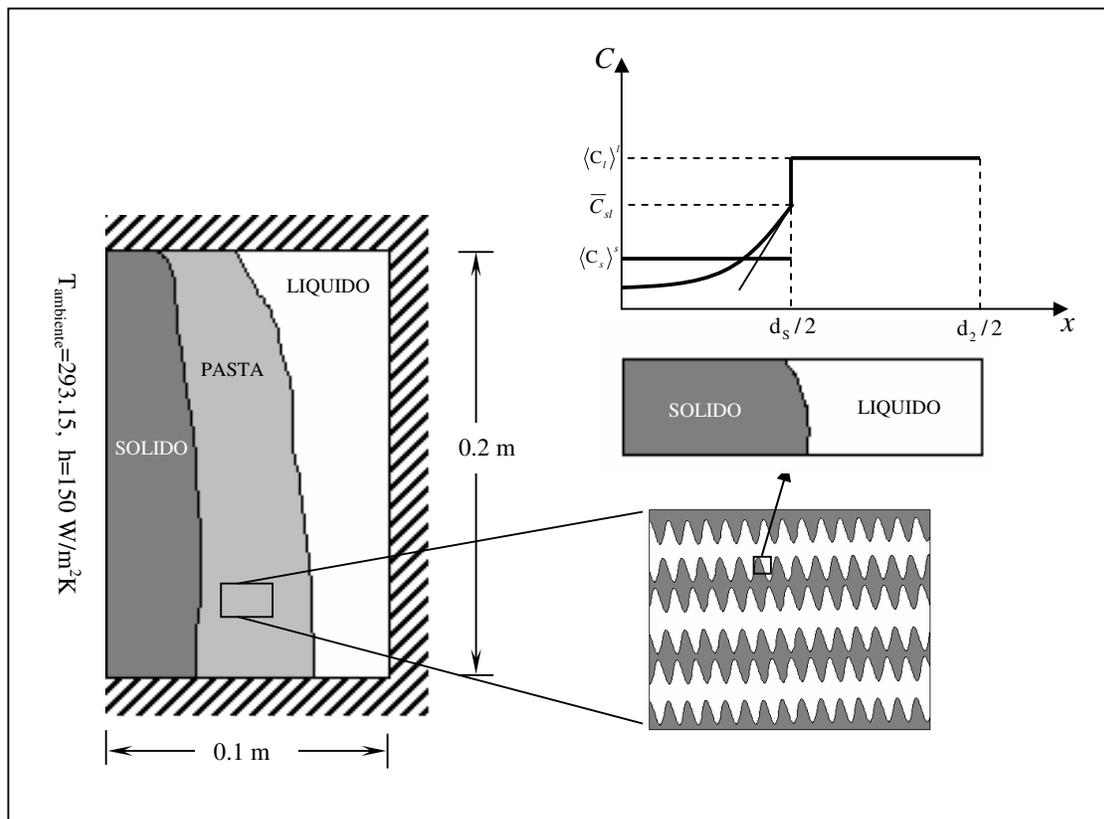


Figura 3. Dominio de cálculo, condiciones de borde y esquema del modelo unidimensional de placas para los brazos dendríticos secundarios

## 5 PROCEDIMIENTO DE CÁLCULO

El método empleado para la discretización de las ecuaciones diferenciales parciales fue el de Volúmenes Finitos en coordenadas cartesianas. Se utilizó el algoritmo SIMPLER (Semi Implicit Method for Pressure Linked Equation *Revised*) para acoplar las ecuaciones de conservación de momentum y masa. El sistema de ecuaciones lineales asociado al modelo discreto, se resuelve en forma iterativa para cada variable dependiente, mediante la técnica de barrido Línea a Línea y el método directo TDMA (Tri-Diagonal Matrix Algorithm). Adicionalmente se introducen parámetros de subrelajación para mejorar el rendimiento del método conjunto Línea a Línea y TDMA y disminuir las inestabilidades numéricas, producto de las no-linealidades presentes en el modelo matemático. El esquema usado para el avance temporal fue el esquema Implícito o  $\delta$ -esquema con  $\delta = 1$ . La selección de este esquema se debe a que es incondicionalmente estable, pero de orden 1 en error; utilizando  $\delta = 1/2$  o Crank-Nicolson, se mejora la precisión del cálculo debido a que el error decrece a orden 2, pero no está demostrado matemáticamente que sea incondicionalmente estable para este modelo.

Para el cálculo de la fracción de sólido se consideró la ec. (10) y las ecuaciones discretas para la concentración del líquido y la temperatura. Reemplazando la temperatura y concentración del líquido de un volumen de control P, en (10) se obtiene:

$$\frac{CCT + \alpha \epsilon_s}{APT} = T_f + \frac{dT}{dC} \left( \frac{CCL + \gamma \epsilon_s}{APC - \beta \epsilon_s} \right) \quad (22)$$

donde

$$CCT = \sum a_{NB}^T T_{NB} + \hat{S}_C \times Vol_p \quad (22)$$

$$APT = \sum a_{NB}^T + \frac{\rho_l}{\Delta t} \frac{\partial \langle h_l \rangle^l}{\partial T} \times Vol_p \quad (23)$$

$$\alpha = \frac{\rho_l}{\Delta t} (\langle h_l \rangle^l - \langle h_s \rangle^s) \times Vol_p \quad (24)$$

$$CCL = \sum a_{NB}^C C_{NB} + \frac{\rho_l}{\Delta t} (\epsilon_s^0 \langle C_s \rangle_P^s + \langle C_l^0 \rangle_P^l) \times Vol_p \quad (25)$$

$$APC = \sum a_{NB}^C + \frac{\rho_l}{\Delta t} (\epsilon_s^0 + 1) \times Vol_p \quad (26)$$

$$\gamma = \frac{\rho_l}{\Delta t} [\langle C_s^0 \rangle_P^s - \langle C_l^0 \rangle_P^l - 2 \langle C_s \rangle^s] \times Vol_p \quad (27)$$

$$\beta = 2 \frac{\rho_l}{\Delta t} Vol_p \quad (28)$$

Despejando  $\varepsilon_s$  desde (19), se obtiene una ecuación de segundo grado para la fracción de sólido. Debe notarse que este mismo procedimiento se puede emplear para sistemas multicomponentes, pero la ecuación que resulta, impide el despeje directo de la fracción de sólido, por lo que se hace necesario usar una técnica numérica para su solución, tal como Newton-Raphson u otra similar.

## 6 RESULTADOS

En orden de ilustrar los resultados de un modelo matemático micro-macroscópico, sobre la solidificación de una aleación binaria de Fe-C, se simuló este proceso utilizando una malla uniforme de 40x80 volúmenes de control y un paso de tiempo de 0.1s.

Para probar el código computacional, se realizó un cálculo sin flujo. Este arrojó resultados razonables que están de acuerdo con el diagrama de fases de la aleación, ya que la concentración del último sólido fue muy cercana a la composición inicial ( $C_o = 0.8$  and  $C_s^* = 0.795$ ). Además, la composición del líquido y la temperatura concordaron con la línea del liquidus.

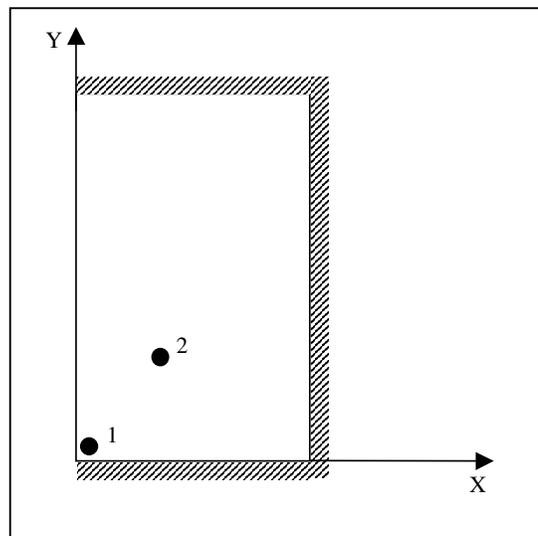


Figura 4. Disposición de los puntos de control

Los parámetros de subrelajación usados, fueron iguales a 0.1 para todas las variables.

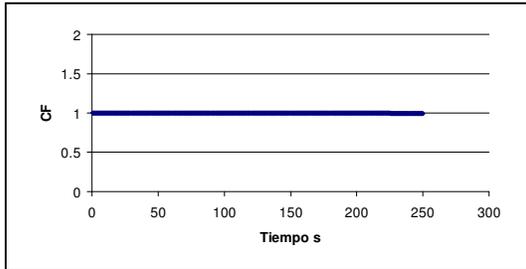
### 6.1 Cálculo del Factor de Conservación:

Es evidente que la cantidad total de soluto debe ser constante en el sistema durante todo el proceso, en ese sentido, fue calculado un factor que da cuenta de la cantidad total de soluto en el dominio en cada paso de tiempo. El factor está dado por:

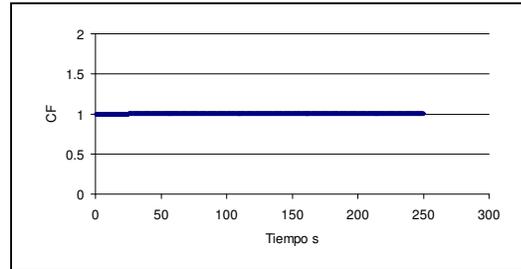
$$C_{mix} = \varepsilon_s C_l + \varepsilon_l C_s \quad (29)$$

Factor de Conservación:

$$CF = \frac{\int C_{mix} \times vol(i, j) dv}{C_0 \int vol(i, j) dv} \quad (30)$$

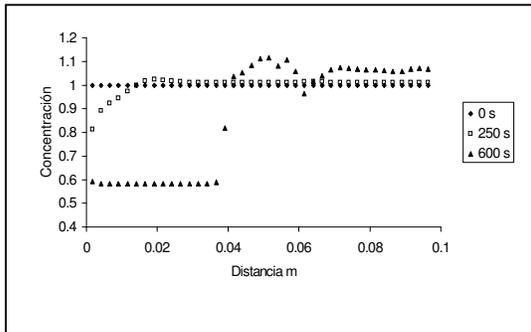


**Fig 5.** Factor de conservación para el caso con flujo

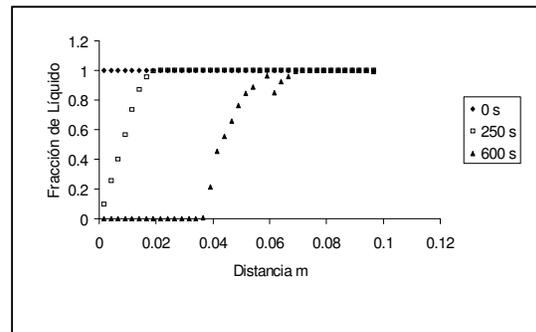


**Fig 6.** Factor de conservación para el caso sin flujo

Para que los cálculos posean un sentido físico, es necesario que se cumpla  $CF \equiv 1$  en cada paso de tiempo, lo que se cumplió sin inconvenientes, según se ilustra en las figuras 5 y 6.



**Figura 7.** Perfiles de concentración de la mezcla, en diferentes tiempo, en la línea central de la cavidad



**Figura 8.** Perfiles de la fracción de líquido en diferente tiempos, en la línea central de la cavidad.

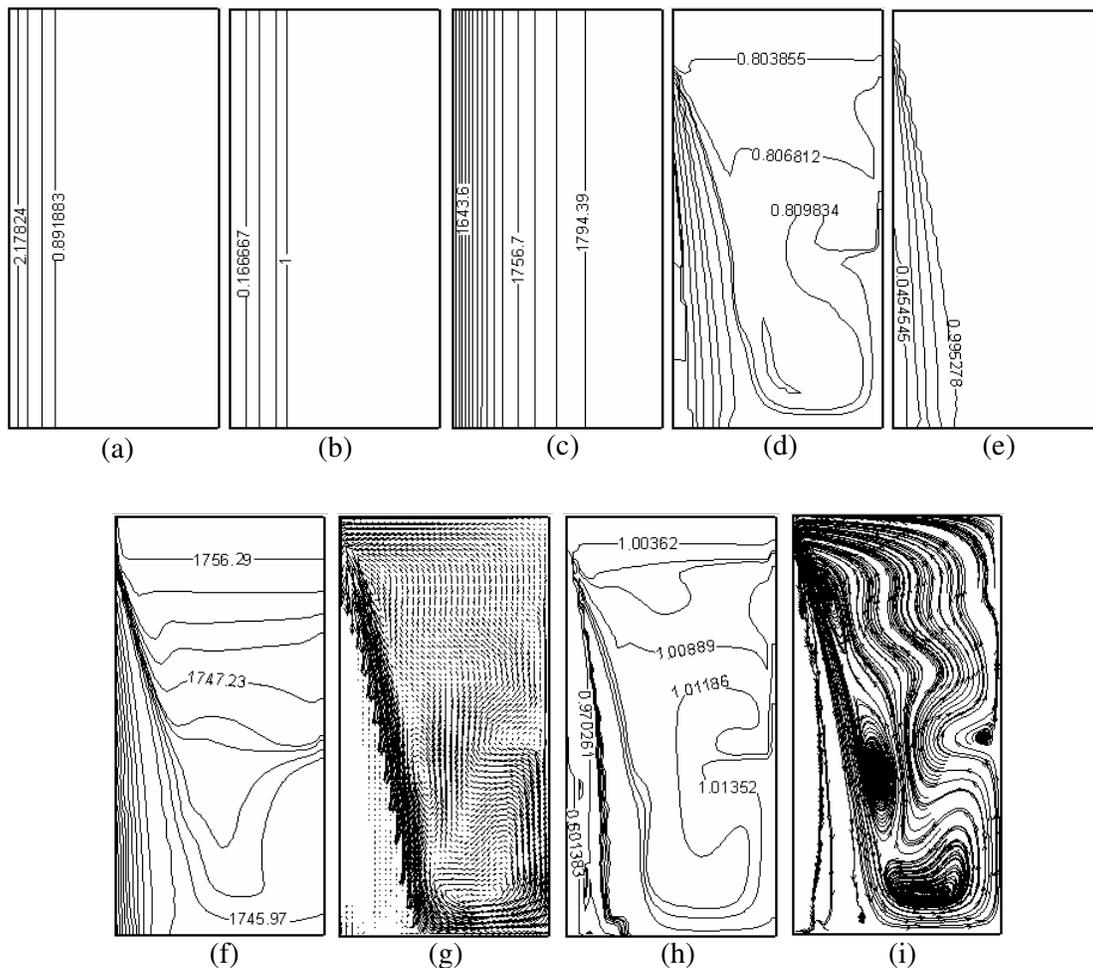


Figura 9. Cálculos sin considerar flujo (a) - (c); (a) Concentración del líquido, (b) fracción de líquido, (c) temperatura. Cálculos con flujos (d) - (i); (d) concentración del líquido, (e) fracción de líquido, (f) temperatura, (g) campo de velocidades, (h) concentración de la mezcla, (i) líneas de corriente. Tiempo igual a 250 s.

La figura 7 muestra diferentes perfiles para la concentración normalizada de la mezcla, se aprecia el efecto de la convección de soluto, generando grandes diferencias entre la composición del sólido y del líquido, producto del transporte de soluto desde la zona pastosa hacia el líquido. Este efecto no se observa cuando se realizan los cálculos sin flujo, manteniéndose una concentración de la mezcla constante. Esto se debe a que la velocidad de transporte de soluto, debido sólo a la difusión, es muy lenta en comparación con la velocidad de enfriamiento de la aleación, por tanto, el soluto no alcanza a redistribuirse sobre distancias macroscópicas. La figura 8 presenta la fracción de líquido en la línea central de la cavidad para distintos tiempos.

La convección natural afecta marcadamente los patrones de las isothermas, concentraciones y la fracción de líquido, generándose extraños diseños. Mientras que en el caso sin flujo, las líneas son paralelas y verticales. En la figura 9 (g), se logra ver una fuerte influencia de la permeabilidad en la zona pastosa sobre la mecánica de fluidos, donde presenta una gran resistencia al flujo, traduciéndose en una marcada diferencia en los vectores de velocidad.

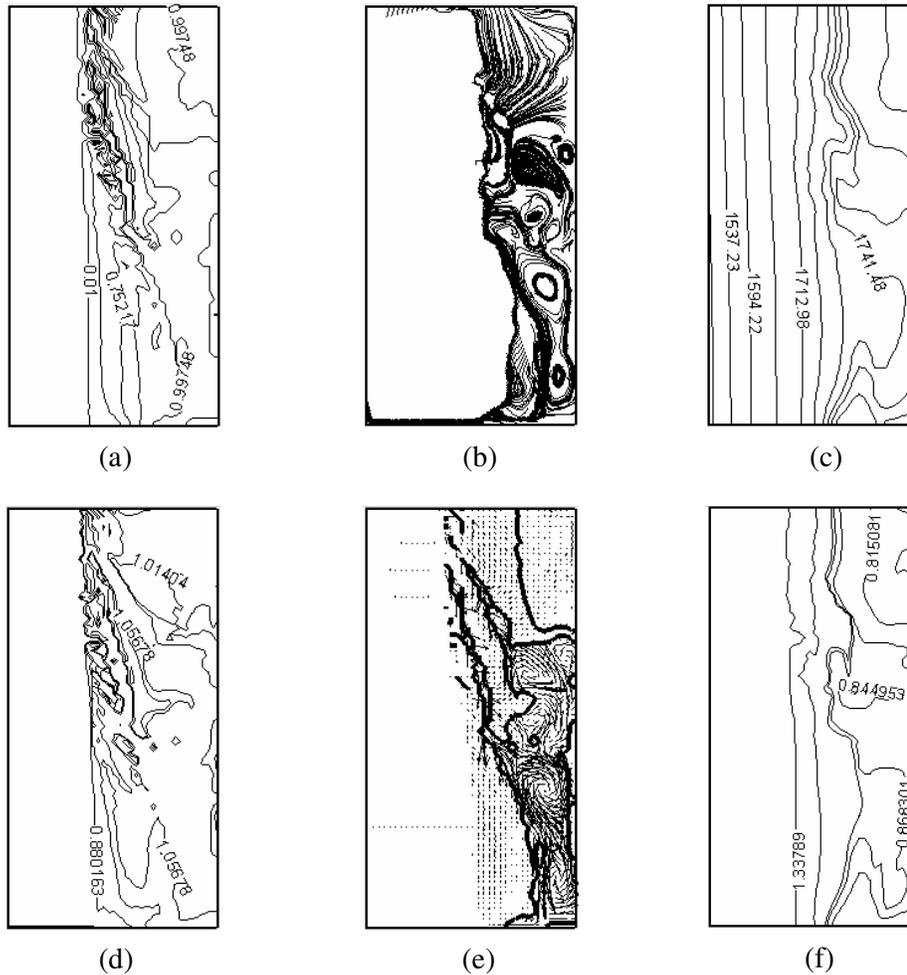


Figura 10. Cálculos considerando flujo, en 600 s. (a) Fracción de líquido, (b) líneas de corriente, (c) temperatura, (d) concentración de la mezcla, (e) vectores de velocidad y fracción de líquido igual a 0.99, (f) concentración del líquido

Cuando el tiempo ha transcurrido, la distribución de todas las variables, se torna mucho más irregular. La zona pastosa ya no es fácil distinguirla como en la figura 9 (e), además se aprecia un flujo confinado en la figura 10 (e). Para el tiempo 250s, el patrón de distribución entre la

concentración de la mezcla es muy similar a la distribución de la concentración en el líquido, pero es absolutamente diferente para el tiempo 600s.

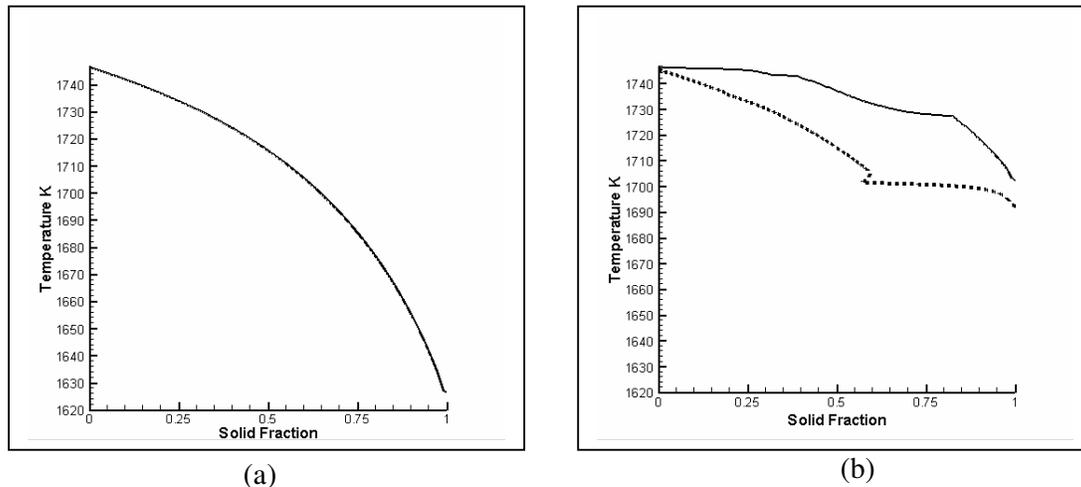


Figura 11. Fracción de sólido en el punto 1 y 2 de la figura 4. (a) Cálculo sin flujo, en este caso, coinciden las curvas en los dos puntos. (b) Cálculo con flujo; la línea punteada corresponde al punto 1 y la línea continua al punto 2.

En la figura 11, se presenta la relación existente entre la fracción de sólido y la temperatura. Se aprecian grandes diferencias en las curvas y especialmente en las temperaturas de solidificación. En el caso sin flujo (a), la línea es suave y regular, muy similar a las gráficas obtenidas mediante soluciones analíticas. La Figura 11 (b) representa uno de los efectos más importante del modelo, ya que la temperatura de solidificación no es igual en todos los puntos, debido a la reyección de soluto desde la zona pastosa hacia el líquido. Es este tipo de fenómeno, el causante de la formación de Freckles, generándose inhomogeneidades serias en la concentración y por consiguiente en las propiedades mecánicas y metalúrgicas de la aleación.

## 7 CONCLUSIONES

Se ha implementado computacionalmente con el método de volúmenes finitos, un modelo micro-macroscópico para estudiar los fenómenos de transporte durante la solidificación de aleaciones binaria. Mediante este modelo, se ha investigado los efectos de la convección termosolutal, sobre la distribución de soluto, la temperatura y la fluido dinámica, tanto en el líquido como en la zona bifásica para una aleación de Fe-0.8% C. Los resultados muestran un frente de solidificación irregular, muy diferente al obtenido con otros modelos, que no consideran la distribución de soluto o que postulan convenientes relaciones para la variación de la fracción de sólido con la temperatura. En este trabajo se ha logrado

implementar una metodología para el cálculo de la fracción de sólido, basada en el equilibrio termodinámico entre la temperatura y la concentración del líquido. El código computacional desarrollado íntegramente en el marco de este artículo, muestra un buen comportamiento, generando resultados en acuerdo con el diagrama de fases. Este trabajo constituye la fase inicial de una investigación enfocada finalmente a la expansión de este modelo a un esquema tridimensional y su comparación con resultados experimentales.

### AGRADECIMIENTOS

Se agradece a CONICYT, proyecto FONDECYT 1030209.

Uno de los autores (ABCH) agradece a CONICYT, institución que ha permitido el desarrollo de esta investigación, a través de la Beca de Apoyo de Tesis Doctoral 2002.

### REFERENCIAS

- [1] J. Ni and C. Beckermann: *Metall. Trans. B*, 1991, vol. 22B, pp. 349-361.
- [2] R. N. Hills, D. E. Loper, and P. H. Roberts: *Q. J. Mech. Appl. Mathematics*, 1983, vol. 36, pp. 505-536.
- [3] V. C. Prantil and P. R. Dawson: *Transport Phenomena in Materials Processing*, ASME, New York, NY, 1983, pp 469-484.
- [4] W. D. Bennon and F. P. Incropera: *Int. J. Heat Mass Transfer*, 1987, vol. 30, pp. 2161-2170.
- [5] D. A. Drew: *Ann. Rev. Fluid Mech.*, 1983, vol. 15, pp. 261-291.
- [6] C. Beckermann and R. Viskanta: *PhysicoChem. Hydrodyn.*, 1988, vol. 10, pp. 195-213.
- [7] R. Viskanta and C. Beckermann: *Interdisciplinary Issues in Materials Processing and Manufacturing*, ASME, New York, NY, 1987, vol. 2, pp. 501-526.
- [8] M. Rappaz: *Int. Mater. Rev.*, 1989, vol. 34, pp. 93-123.
- [9] M. C. Schneider and C. Beckermann: *Metall. and Mater. Trans. A*, 1995, vol. 26, pp. 2373-2388.