

**PROYECTO DE INVESTIGACIÓN INTERNOS SIN
FINANCIAMIENTO O AUTOGESTIONADOS**
ANEXO 1 - DATOS INFORMATIVOS

Fecha de presentación (dd/mm/aa): 06/06/2019

Título del proyecto: **Desarrollo de métodos numéricos para predecir la formación de microestructuras durante la solidificación de aleaciones**

TIPOS DE INVESTIGACIÓN

Investigación básica X

Investigación aplicada □

DEPARTAMENTO(S) Y/O INSTITUTO(S):

1. Departamento de Ingeniería Mecánica

LÍNEA(S) DE INVESTIGACIÓN (verificable en el SAEW):

1. Modelización, Simulación y Optimización de Procesos de Física Térmica, código UNESCO-2 ✓

2. Desarrollo, caracterización y procesamiento de materiales sólidos, código UNESCO-2 * No registrada en el UIPS

RESUMEN DE INFORMACIÓN DEL DIRECTOR Y COLABORADORES

Director

Apellidos y nombres	No. de Cédula	HSS	Departamento	Título de mayor nivel y mención.
Rojas Molina Roberto Carlos	0502343148	8 ✓	Ingeniería Mecánica	PhD

Colaborador(es)

Apellidos y nombres	No. de Cédula	HSS	Departamento	Título de mayor nivel y mención.
Sotomayor Grijalva María Verónica	1713194189	4 ✓	Materiales	MSc

Colaboradores Externos

Apellidos y nombres	No. de identificación	HSS	Institución	Título de mayor nivel y mención.

* HSS = Horas Semana Semestre



HOJA DE VIDA DEL DIRECTOR DEL PROYECTO

Datos Personales				
Nombre Completo:	Roberto Carlos Rojas Molina			
No. de Identificación:	0502343148	Nacionalidad:	Ecuatoriana	
Fecha de nacimiento:	29-11-1982	Celular:	0995100560	Ext. EPN: 3747
Correo institucional:	roberto.rojas@epn.edu.ec			
Cargo Actual en la EPN:	Profesor agregado 1			
Facultad:	Facultad de Ingeniería Mecánica			
Departamento:	Departamento de Ingeniería Mecánica			

Educación universitaria. Proveer el nombre de los títulos de pregrado y postgrado (Ing., Magister, Ph.D.)				
Título	Año	Institución/Universidad	Ciudad/País	Área o línea de investigación de la tesis
Doctor en Ingeniería Mecánica	2013	Universidad de Kobe	Kobe-Japón	Fluid dynamics, high performance computing, solid-liquid two phase flows, numerical methods
Maestría en Ingeniería Mecánica	2011	Universidad de Kobe	Kobe-Japón	Fluid dynamics, high performance computing, aeroacoustics, numerical methods
Ingeniero Mecánico	2007	Escuela Politécnica Nacional	Quito-Ecuador	Fluid dynamics, composite materials

Experiencia investigativa y en ejecución de proyectos (cite los tres más relevantes)		
Año	Título del proyecto	Cargo /Actividades realizadas
2017-present	Collaboration research with Escuela Politécnica Nacional: combustion, particle emissions and CFD	Discussion and elaboration of projects for future collaboration
2016-2018	Elaboración de un plan de información y contingencia ante eventos oceánicos extremos para la Municipalidad de San Cristóbal	Development of CUDA algorithms for data processing
2015-2016	Large-scale and GPU-accelerated phase-field calculations of dendrite competitive growth mechanism	High performance computing with CPUs and GPUs
2013-2016	Development of a numerical multiphysics model for expressing new features of materials by nanostructured control, collaborative research with TOYOTA MOTOR CORPORATION	Numerical methods: phase-field method and lattice Boltzmann method
2011-2013	Immersed boundary-finite difference lattice Boltzmann method for predicting particulate flow	Numerical methods for two-phase flows, high performance computing

770

Publicaciones, patentes, prototipos o productos (cite las más relevantes dentro de los últimos cinco años y que se encuentren alineados al proyecto de investigación)	
1.	Takaki, T., Sato, R., Rojas, R., Ohno, M., Shibuta, Y., Phase-field lattice Boltzmann simulations of multiple dendrite growth with motion, collision, and coalescence and subsequent grain growth, Computational Materials Science, 2018, 147,124-131. [Q1, H index 85] https://doi.org/10.1016/j.commatsci.2018.02.004
2.	Takaki, T., Rojas, R., Sakane, S., Ohno, M., Shibuta, Y., Shimokawave, T., Aoki, T., Phase-field-lattice Boltzmann studies for dendritic growth with natural convection, Journal of Crystal Growth, 2017, 474,146-153. [Q1, H index 125] https://doi.org/10.1016/j.jcrysgro.2016.11.099



3.	Sakane, S., Takaki, T., Rojas, R., Ohno, M., Shibuta, Y., Shimokawave, T., Aoki, T., Multi-GPUs parallel computation of dendrite growth in forced convection using the phase-field-lattice Boltzmann model, Journal of Crystal Growth, 2017, 474, 154-159. [Q1, H index 125] https://doi.org/10.1016/j.jcrysgro.2016.11.103
4.	Rojas, R., Takaki, T., Ohno, M., A phase-field-lattice Boltzmann method for modeling growth and motion of a dendrite for binary alloy solidification in the presence of melt convection, Journal of Computational Physics, 2015, 298, 29-40. [Q1, H index 196] https://doi.org/10.1016/j.jcp.2015.05.045
5.	Takaki, T., Rojas, R., Ohno, M., Shimokawave, T., Aoki, T., GPU phase-field-lattice Boltzmann simulations of growth and motion of a binary alloy dendrite, IOP Conference Series Materials Science and Engineering, 2015, 84, 012066. [H index 13] https://doi.org/10.1088/1757-899X/84/1/012066
6.	Seta, T., Rojas, R., Hayashi, K., Tomiyama, A., Implicit-Correction-based Immersed Boundary-Lattice Boltzmann Method using Two Relaxation Times, Physical Review E, 2014, 89, 023307. [Q1, H index 178] https://doi.org/10.1103/PhysRevE.89.023307
7.	Rojas, R., Hayashi, K., Seta, T., Tomiyama, A., Immersed Boundary-Finite Difference Lattice Boltzmann Method using Two Relaxation Times, Journal of Fluid Science and Technology, 2013, 8(3), 262-276. http://doi.org/10.1299/jfst.8.262
8.	Rojas, R., Hayashi, K., Seta, T., Tomiyama, A., Numerical Simulation of Flows about a Stationary and a Free-Falling Cylinder Using Immersed Boundary-Finite Difference Lattice Boltzmann Method, Journal of Computational Multiphase Flows, 2013, 5(1), 27-45. [Q2, H index 9] https://doi.org/10.1260/1757-482X.5.1.27

Experiencia profesional, otros trabajos científicos y técnicos (cite lo más relevante o las más recientes)

1. April, 2016-present; Escuela Politécnica Nacional; Quito-Ecuador;
Lecturer
Theory of Machines, Heat Transfer, Maintenance Engineering, Thermodynamics, Fluid Mechanics, Numerical Analysis
Contact: jesus.portilla@epn.edu.ec
2. October, 2013-March, 2016; Kyoto Institute of Technology; Kyoto-Japan;
Research Fellow
Development and optimization of multiphysics models for new features of materials using coupled numerical methods
Contact: takaki@kit.ac.jp
3. May, 2013-August, 2013; Kobe University; Kobe-Japan;
Research Assistant
Implementation of parallel computations for predicting particulate flows
Contact: tomiyaama@people.kobe-u.ac.jp
4. August, 2007-February, 2008; INCOAYAM; Quito-Ecuador;
Engineer
Design of gas pipeline networks for residential and industrial uses
Contact: incoayam@incoayam.com.ec, +593 22806300



HOJA DE VIDA DEL PROFESOR COLABORADOR DEL PROYECTO (1)

Datos Personales					
Nombre Completo:	MARÍA VERÓNICA SOTOMAYOR GRIJALVA				
No. de Identificación:	1713194189	Nacionalidad:	Ecuatoriana		
Fecha de nacimiento:	29-04-1981	Celular:	0986055495	Ext. EPN:	3003
Correo institucional:	veronica.sotomayor@epn.edu.ec				
Cargo Actual en la EPN:	Profesor Auxiliar a Tiempo Completo				
Facultad:	Ingeniería Mecánica				
Departamento:	Materiales				

Educación universitaria. Proveer el nombre de los títulos de pregrado y postgrado (Ing., Magister, Ph.D.)				
Título	Año	Institución/Universidad	Ciudad/País	Área o línea de investigación de la tesis
Magister	2009	Universidad Rey Juan Carlos	Madrid-España	Materiales / Recubrimientos Cerámicos en Barreras Térmicas
Ingeniera Mecánica	2007	escuela politécnica nacional	Quito-Ecuador	Elementos Finitos / Estructuras

Experiencia investigativa y en ejecución de proyectos (cite los tres más relevantes)		
Año	Título del proyecto	Cargo /Actividades realizadas
2017-2018	Proyecto de Investigación Semilla PIS-16-07 "Caracterización y evaluación de discontinuidades mediante radiografía industrial aplicando el criterio geométrico de penumbra"	Director
2009-2010	Proyecto de Investigación PIC-08-493 "Desarrollo de Nuevos Materiales para Aplicaciones Estructurales e Industriales"	Profesional Investigador

Publicaciones, patentes, prototipos o productos (cite las más relevantes dentro de los últimos cinco años y que se encuentren alineados al proyecto de investigación)	
1.	Guerrero, V.H. (Ed.). (2011). Nuevos Materiales y Aplicaciones Estructurales e Industriales. Quito, Ecuador: Impreffep
2.	Cely, M., & Sotomayor V. (septiembre de 2017). Pinhole Imaging Standard Method in the Determination of the Focal Spot of an X-Ray Tube for the Evaluation of Quality of Radiographic Images of Welded Joints. In S. Kenderian (Ed.), Proceedings of Research, Advancing NDE Technologies, Research and Engineering in a Changing World: ASNT 26 th Research Symposium (pp. 22-33). Columbus, United States of America: The American Society for Nondestructive Testing, Inc.
3.	Cely, M., Jami, B., Sotomayor V. (Enero de 2018). Desarrollo de una Metodología para la Obtención de Diagramas de Exposición Radiográfica para Probetas de Acero y Aluminio Mediante el Uso de un Equipo Generador de Rayos X. Revista Politécnica, 40, No. 2, 31-40.
4.	Cely, M., Sotomayor V., Monar W., Castro P. (3 de mayo de 2018). Identificación de defectos en soldaduras de acero estructural ASTM A 36 mediante ensayos no destructivos según el código AWS D1.1. Revista PUCE, 106, 81-109.

Experiencia profesional, otros trabajos científicos y técnicos (cite lo más relevante o las más recientes)	
•	Prácticas profesionales en Centro Nacional de Investigaciones Metalúrgicas, CENIM, Madrid-España. (abril 2008 hasta septiembre 2009)



ESCUELA POLITÉCNICA NACIONAL
VICERRECTORADO DE INVESTIGACIÓN Y PROYECCIÓN SOCIAL



- Profesional Investigador, Proyecto PIC-08-493, Escuela Politécnica Nacional. (Sep. a Dic. 2010; Ag. a Dic. 2011)
- Miembro de equipo de Investigación y Desarrollo, NOVACERO S.A. (marzo 2012 a septiembre 2014)
- Docente e Investigador, Facultad de Ingeniería Mecánica, Escuela Politécnica Nacional (desde septiembre 2014 hasta actualidad).

HOJA DE VIDA DEL PROFESOR COLABORADOR DEL PROYECTO (2)

Datos Personales			
Nombre Completo:			
No. de Identificación:		Nacionalidad:	
Fecha de nacimiento:		Celular:	Ext. EPN:
Correo institucional:			
Cargo Actual en la EPN:			
Facultad:			
Departamento:			

Educación universitaria. Proveer el nombre de los títulos de pregrado y postgrado (Ing., Magister, Ph.D.)				
Título	Año	Institución/Universidad	Ciudad/País	Área o línea de investigación de la tesis

Experiencia investigativa y en ejecución de proyectos (cite los tres más relevantes)		
Año	Título del proyecto	Cargo /Actividades realizadas

Publicaciones, patentes, prototipos o productos (cite las más relevantes dentro de los últimos cinco años y que se encuentren alineados al proyecto de investigación)	
1.	
2.	
3.	
4.	
5.	



**PROYECTO DE INVESTIGACIÓN INTERNOS SIN
FINANCIAMIENTO O AUTOGESTIONADOS**
ANEXO 2 – DETALLES DE LA PROPUESTA

Investigación Básica <input checked="" type="checkbox"/>	Investigación Aplicada <input type="checkbox"/>
DEPARTAMENTO(S) Y/O INSTITUTO(S): 1. Departamento de Ingeniería Mecánica	
LINEA(S) DE INVESTIGACIÓN: 1. Modelización, Simulación, y Optimización de Procesos de Física Térmica, código UNESCO-2 2. Desarrollo, caracterización y procesamiento de materiales sólidos, código UNESCO-2	

DISCIPLINA CIENTÍFICA (Marque X, solamente una opción)	
Ciencias Naturales y Exactas;	
Ingeniería y Tecnologías;	X
Ciencias Médicas;	
Ciencias Agrícolas;	
Ciencias Sociales;	
Humanidades	

OBJETIVO SOCIOECONÓMICO (Marque X, solamente una opción)	
Exploración y explotación del medio terrestre;	
Ambiente;	
Exploración y Explotación del espacio;	
Transporte, telecomunicaciones y otras infraestructuras;	
Energía;	
Producción y tecnología industrial;	
Salud;	
Agricultura;	
Educación;	
Cultura, ocio, religión y medios de comunicación;	
Sistemas políticos y sociales, estructuras y procesos;	
Defensa;	
Avance general del conocimiento: I+D financiada con los Fondos Generales de Universidades (FGU);	X
Avance general del conocimiento: I+D financiados con otras fuentes.	

770

1 Proyecto de Investigación
Título: Desarrollo de métodos numéricos para predecir la formación de la microestructura durante la solidificación de aleaciones en crecimiento libre



<p>Resumen del proyecto (máximo 200 palabras)</p> <p>La solidificación es un proceso muy importante en el desarrollo de nuevos y existentes materiales metálicos. En este proceso varios fenómenos físicos ocurren simultáneamente dentro de una mezcla fundida líquido-sólido con una interfaz en movimiento. La propagación de la interfaz determina el crecimiento y la posterior formación de la microestructura de los metales. Esta microestructura determina las propiedades de los materiales, por tanto, entender y dilucidar los mecanismos presentes en la solidificación podría ayudar a controlar el procesamiento de materiales, y abrir la puerta para el rápido desarrollo y avance tecnológico de los materiales metálicos. En este trabajo de investigación, se propone un método numérico exacto y eficiente para predecir la formación de las microestructuras durante la solidificación de aleaciones en crecimiento libre. Para este propósito es indispensable la combinación de métodos numéricos para resolver el componente sólido y el componente líquido de la mezcla, y además, un novedoso tratamiento numérico de algunos parámetros como: difusión de momento y masa; movimiento e interacción de sólidos; viscosidad; tensión superficial; entre otros. Simulaciones numéricas se llevarán a cabo para predecir apropiadamente los procesos de solidificación.</p>
<p>Palabras clave (4-6): Métodos numéricos, Multifísica, Solidificación, Microestructuras de aleaciones, Flujo multifásico líquido-sólido, Simulación con cálculos en paralelo</p>

20

2	Objetivos, relevancia, productos y resultados esperados de esta propuesta de investigación
----------	---

2.1 Objetivos

2.1.1 Objetivo General

Desarrollar métodos numéricos exactos para predecir la formación de la microestructura de materiales durante la solidificación de aleaciones en crecimiento libre

2.1.2 Objetivos Específicos

- Analizar los fenómenos físicos que se presentan durante la formación de la microestructura de materiales en el proceso de solidificación.
- Proponer un método numérico que incluya varios fenómenos físicos que ocurren simultáneamente (Multifísica) en la solidificación de aleaciones
- Simular el proceso de solidificación de aleaciones en crecimiento libre y dilucidar los mecanismos de formación de la estructura de materiales
- Evaluar las variables que influyen en el proceso de solidificación y establecer la relación de los parámetros numéricos con las propiedades reales de los materiales



2.2 Detalle de los resultados esperados (con relación a los objetivos)

- a. Publicación de un artículo científico indexado nivel 1 o nivel 2. Un posible título del artículo científico sería: "A novel numerical method for predicting microstructure formation during the solidification of alloys undergoing dendritic growth, motion, collision and coalescence". Alternativamente se puede realizar una publicación de un artículo científico en la Revista de la Escuela Politécnica Nacional.
- b. Difusión de los resultados en el ciclo de conferencias organizado por la Facultad de Ingeniería Mecánica.

3 Relevancia de la propuesta de investigación y su relación con la(s) líneas de investigación

La solidificación es un proceso muy importante en el desarrollo de materiales metálicos. Este proceso involucra varios fenómenos físicos que ocurren simultáneamente a diferentes escalas. Así, la materia que experimenta solidificación es un flujo multifásico líquido-sólido con el movimiento de una interfaz cuya fuerza impulsora puede ser un gradiente de temperatura y un gradiente de concentración en el caso de aleaciones. De los fenómenos que ocurren a escala microscópica se pueden mencionar la difusión de calor, la difusión de momento, la difusión de soluto, la tensión superficial, la energía en la interfaz, el movimiento de la mezcla, el movimiento de sólidos dentro de la fundición, y las interacciones entre cada uno de estos que dan como resultado el crecimiento de grano y la posterior formación de la microestructura sólida de un material metálico. Esta microestructura establece las propiedades y la resistencia mecánica de las aleaciones a una escala macroscópica. Por tanto, entender y dilucidar los mecanismos envueltos en la formación de la microestructura en la solidificación ayudaría a controlar el proceso, lo cual abre la puerta para el rápido desarrollo y avance tecnológico de nuevos materiales metálicos o mejoras en los existentes. En el presente proyecto, se propone un método numérico exacto y eficiente para predecir los mecanismos de formación de la microestructura de materiales en la solidificación de aleaciones en crecimiento libre. Por tanto, en este trabajo de investigación se plantea estudiar los fenómenos físicos presentes en la solidificación de aleaciones y se contempla la apropiada integración de propiedades reales como la viscosidad, difusividad, tensión superficial, etc.; y procesos que involucren el movimiento de la mezcla fundida en el modelo propuesto. Esto es posible llevando a cabo simulaciones. De esta manera, se contribuye directamente al desarrollo del conocimiento global de los procesos de solidificación, y mediante simulaciones numéricas sería posible tener un apropiado control y estimación de las microestructuras que se generan en este proceso.

4 Productos esperados (marcar con una "X" al menos uno de los productos no señalados)

Tipo de Producto:	Marcar con una "X"
a. Disertación a la Comunidad Politécnica (obligatorio);	X
b. Presentación de un artículo en formato de la Revista Politécnica (obligatorio)	X
c. Proyecto de Titulación;	
d. Aplicación tecnológica construida o implementada;	
e. Patente presentada;	
f. Perfil de proyecto de mayor impacto científico, técnico, pedagógico o de innovación.	
g. Publicaciones científicas indexada en SCIMAGO-SCOPUS/WoS/SCIELO/Latindex Catálogo o un artículo en congreso indexado en SCOPUS.	X



5 Descripción, metodología y diseño del proyecto

5.1 Descripción, metodología y diseño del proyecto (Máximo dos carillas)

El presente proyecto está relacionado con la solidificación de aleaciones en crecimiento libre. La materia en este proceso es una mezcla fundida subenfriada que físicamente es un flujo multifásico líquido-sólido, donde núcleos sólidos crecen hasta formar la estructura del material. Estos sólidos tienen dos opciones de crecimiento: pueden crecer libremente cuando los núcleos están aislados, o pueden crecer de manera columnar cuando los núcleos se encuentran en las paredes del recipiente donde coexiste la mezcla [1]. Varios fenómenos microscópicos ocurren en el proceso. Por ejemplo: durante el proceso de vertido de la mezcla ocurre convección forzada; la convección natural da lugar al movimiento de sólidos debido a la diferencia de densidades entre el sólido y el líquido; el crecimiento del sólido se da por la difusión de calor y masa; y la forma de estructura se da por la tensión superficial, anisotropía y la energía de la interfaz. Existen diferentes modelos numéricos para resolver la solidificación de metales donde los fenómenos se estudian individualmente o parcialmente combinados [2, 3, 4]. Recientemente, con la ayuda de computadoras de alto rendimiento, nuevos modelos numéricos han sido propuestos dentro de la institución para analizar microscópicamente fenómenos como movimiento de sólidos [5, 6], convección forzada y natural [6, 7], movimiento microscópico de la interfaz [8] y el crecimiento de múltiples sólidos [9]. Sin embargo, estos modelos no consideran apropiadamente aspectos importantes como la viscosidad real de la mezcla fundida y el movimiento de sólidos en la mezcla. En este proyecto, se propone un método numérico capaz de simular solidificación con los diversos fenómenos que ocurren simultáneamente en el material. De esta manera, es posible entender los mecanismos de solidificación de aleaciones y generar conocimiento fundamental en este tema.

Metodología

Este proyecto es de investigación básica, y parte con el estudio de los distintos métodos numéricos disponibles para el proceso de solidificación de aleaciones. Para entender la influencia de las distintas variables en la solidificación y clarificar los mecanismos de crecimiento de sólidos en una mezcla fundida, es necesario estudiar los fenómenos físicos por separado.

Inicialmente, el problema a considerar es la solidificación de una mezcla fundida sin movimiento, donde solamente un núcleo sólido aislado crecerá dentro de la mezcla subenfriada. En esta etapa, se utilizará el método "phase-field" para predecir el movimiento de la interfaz. Este método ha sido ampliamente utilizado por su simplicidad y exactitud en la predicción de estructuras dendríticas en metales [2]. Existen algunos modelos que consideran las fuerzas impulsoras para el movimiento de la interfaz, así existen modelos donde se observan la solidificación debida a gradientes de temperatura y la debida a gradientes de concentración de las especies [10, 11]. En esta fase, es importante entender la relación de los efectos cinéticos del movimiento de la interfaz y la anisotropía del material con la escala del problema. Para esto, se llevarán a cabo varias simulaciones con distintos dominios computacionales.

En una segunda etapa, es fundamental estudiar el movimiento de la mezcla fundida. La mezcla está en estado líquido, por tanto, es preciso utilizar un modelo apropiado para predecir el movimiento de fluidos. De las alternativas disponibles, se utilizará el método de "lattice Boltzmann". Este método es factible para computación en paralelo y presenta ventajas sobre otros métodos en términos de simplicidad [12]. Un factor significativo por considerar en esta fase es la interacción líquido-sólido a través de la condición de no-deslizamiento [13]. Sin embargo, lo más importante en este análisis es introducir apropiadamente la viscosidad real de la mezcla fundida que ha sido ignorada en todos los métodos numéricos propuestos hasta el momento.

Observaciones recientes de procesos reales de solidificación muestran movimiento de sólidos dentro de la mezcla debido a procesos como convección natural y forzada [14, 15]. Por tanto, en la tercera etapa se estudia el movimiento de sólidos. Trabajos existentes abordan este tema con precisión [6, 7, 8]. Por tanto, en esta fase se estudiará la manera de acoplar los modelos existentes para predecir movimiento de sólidos con los modelos para predecir los procesos anteriormente mencionados.

La combinación de los diversos modelos numéricos se realizará en una cuarta etapa. En esta etapa, las propiedades físicas y los parámetros numéricos en los distintos modelos deben ser acoplados entre sí, dependiendo de las escalas físicas del problema. Debido a la gran cantidad de fenómenos físicos y su resolución



independiente, el método numérico propuesto es híbrido o combinado. Con este modelo final, se llevarán a cabo varias simulaciones a escala microscópica del crecimiento libre de sólidos aislados dentro de una mezcla subenfriada. Estas simulaciones serán validadas numéricamente.

Diseño del proyecto

Para la ejecución del presente proyecto es necesario separar por fases las distintas actividades que se llevarán a cabo a lo largo del período de realización del proyecto. A continuación, se detallan las fases.

Análisis fenómenos físicos involucrados en los procesos de solidificación

Fase 1: Revisión bibliográfica y análisis individual de los distintos parámetros en el proceso de solidificación.

Fase 2: Recopilación de información relacionada al estado del arte de métodos numéricos para solidificación.

Desarrollo de métodos numéricos para simular procesos de solidificación

Fase 3: Estudio de los fenómenos en la solidificación de aleaciones

Fase 4: Identificación de las variables numéricas para solidificación de núcleos aislados o libres.

Fase 5: Elaboración de métodos numéricos para simulación de aleaciones considerando los distintos parámetros en un flujo líquido-sólido.

Análisis de resultados

Fase 7: Simulaciones de procesos de solidificación de aleaciones a escala microscópica

Difusión de resultados

Fase 8: Publicación de resultados y disertación a la comunidad politécnica.

Referencias

1. J. A. Dantzig, M. Rappaz. (2009). *Solidificación*. (Primera edición). Lausanne, Suiza: EFPL Press
2. T. Takaki. (2014). Phase-field Modeling and Simulations of Dendrite Growth. *ISIJ International*, volumen (54), 437–444
3. Y. Chen, X.B. Qi, D.Z. Li, X.H. Kang, N.M. Xiao. (2015). A quantitative phase-field model combining with front-tracking method for polycrystalline solidification of alloys. *Computational Material Science*, volumen (104), 155–161.
4. B. Böttger, J. Eiken, M. Apel. (2015). Multi-ternary extrapolation scheme for efficient coupling of thermodynamic data to a multi-phase-field model. *Computational Material Science*, volumen (108) (Part B), 283–292.
5. R. Rojas, T. Seta, K. Hayashi, A. Tomiyama. (2011). Immersed boundary-finite difference lattice Boltzmann method for liquid–solid two-phase flows. *Journal of Fluid Science and Technology*, volumen (6-6), 1051–1064.
6. R. Rojas, T. Takaki, M. Ohno. (2015). A phase-field-lattice Boltzmann method for modeling motion and growth of a dendrite for binary alloy solidification in the presence of melt convection. *Journal of Computational Physics*, volumen (298), 29–40.
7. T. Takaki, R. Rojas, S. Sakane, M. Ohno, Y. Shibuta, T. Shimokawabe, T. Aoki. (2017). Phase-field-lattice Boltzmann studies for dendritic growth with natural convection. *Journal of Crystal Growth*, volumen (474), 146–153.
8. S. Sakane, T. Takaki, R. Rojas, M. Ohno, Y. Shibuta, T. Shimokawabe, T. Aoki. (2017). Multi-GPUs parallel computation of dendrite growth in forced convection using the phase-field-lattice Boltzmann model. *Journal of Crystal Growth*, volumen (474), 154–159.
9. T. Takaki, R. Sato, R. Rojas, M. Ohno, Y. Shibuta. (2018). Phase-field lattice Boltzmann simulations of multiple dendrite growth with motion, collision, and coalescence and subsequent grain growth. *Computational Materials Science*, volumen (147), 124–131.
10. A. Karma, W.J. Rappel. (1998). Quantitative phase-field modeling of dendritic growth in two and three dimensions. *Physical Review E*, volumen (57-4), 4323–4349.
11. M. Ohno, K. Matsumura. Quantitative phase-field modeling for dilute alloy solidification involving diffusion in the solid, *Physical Review E*, volumen (79), 031603.
12. S. Succi. (2001). *The Lattice Boltzmann Equation for Fluid Dynamics and Beyond*. (Primera edición). Gran Bretaña: Oxford University Press



13. D. Medvedev, T. Fischaleck, K. Kassner. (2006). Influence of external flows on crystal growth: numerical investigation. *Physical Review E*, volumen (74), 031606.
14. B. Billia, H. Nguyen-Thi, N. Mangelinck-Noel, N. Bergeon, H. Jung, G. Reinhart, A. Bogno, A. Buffet, J. Hartwig, J. Baruchel, T. Schenk. (2010). In Situ Synchrotron X-ray Characterization of Microstructure Formation in Solidification Processing of Al-based Metallic Alloys. *ISIJ International*, volumen (50), 1929–1935.
15. G. Reinhart, H. Nguyen-Thi, N. Mangelinck-Noël, J. Baruchel, B. Billia. (2014) In situ investigation of dendrite deformation during upward solidification of Al-7wt.%Si. *Journal of The Minerals, Metals & Materials Society (TMS)*, volumen (66), 1408–1414.

6 Infraestructura, equipos y fondos adicionales.

6.1 Infraestructura y equipos

- Para el desarrollo de los nuevos modelos numéricos se cuenta con computadoras de la Facultad de Ingeniería Mecánica. Sin embargo, la capacidad de estas computadoras es limitada a dominios computacionales pequeños debido al número de variables involucradas en el proceso.

6.2 Breve justificación del equipo requerido

- Este equipo es requerido y está disponible para realizar simulaciones numéricas

6.3 Fondos Adicionales

- No aplica

77



ESCUELA POLITÉCNICA NACIONAL
Proyecto de Investigación Interno Sin Financiamiento o Autogestionado
ANEXO 3 - CRONOGRAMA DE ACTIVIDADES DEL PROYECTO



Título del Proyecto:

Desarrollo de métodos numéricos para predecir la formación de la microestructura durante la solidificación de aleaciones

		AÑO 1																																																							
Nº	Actividad	Mes 1				Mes 2				Mes 3				Mes 4				Mes 5				Mes 6				Mes 7				Mes 8				Mes 9				Mes 10				Mes 11				Mes 12											
		1	2	3	4	1	2	3	4	1	2	3	4	1	2	3	4	1	2	3	4	1	2	3	4	1	2	3	4	1	2	3	4	1	2	3	4	1	2	3	4	1	2	3	4	1	2	3	4								
1	Análisis de los fenómenos físicos en la solidificación	■	■	■	■	■	■	■	■	■	■	■	■	■	■	■	■	■	■	■	■	■	■	■	■	■	■	■	■	■	■	■	■	■	■	■	■	■	■	■	■	■	■	■	■	■	■	■	■	■	■	■	■	■	■	■	■
1.1	Estudio y revisión bibliográfica de las diversas variables en la solidificación	■	■	■	■																																																				
1.2	Recopilación del estado del arte de los métodos numéricos para solidificación									■	■	■	■	■	■	■	■	■	■	■	■																																				
2	Desarrollo de métodos numéricos para solidificación													■	■	■	■	■	■	■	■	■	■	■	■	■	■	■	■	■	■	■	■	■	■	■	■	■	■	■	■	■	■	■	■												
2.1	Métodos numéricos considerando transferencia de momento, calor y masa													■	■	■	■	■	■	■	■	■	■	■	■	■	■	■	■	■	■	■	■	■	■	■	■	■	■	■	■																
2.2	Métodos numéricos considerando además movimiento, y viscosidad mezcla													■	■	■	■	■	■	■	■	■	■	■	■	■	■	■	■	■	■	■	■	■	■	■	■	■	■	■	■																
2.3	Simulación																													■	■	■	■	■	■	■	■	■	■	■	■																
3	Difusión de resultados																																																								
3.1	Escribir y publicar el artículo científico																																																								
3.2	Divulgar a la comunidad politécnica																																																								
4	Cierre del proyecto																																													■	■	■	■								

**PROYECTO DE INVESTIGACIÓN INTERNOS SIN
FINANCIAMIENTO O AUTOGESTIONADOS**
ANEXO 4 - DECLARACIÓN

TIPO DE INVESTIGACIÓN

Investigación básica X

Investigación aplicada □


TÍTULO DEL PROYECTO

Desarrollo de métodos numéricos para predecir la formación de la microestructura durante la solidificación de aleaciones

DECLARACIÓN DEL DIRECTOR DEL PROYECTO

El equipo de investigadores, representado por el Director del Proyecto declara lo siguiente:

- Que el presente proyecto es una creación original de mi autoría y del equipo de investigadores, y por tanto asumimos la completa responsabilidad legal en caso de que un tercero alegue la titularidad de los derechos intelectuales del proyecto, exonerando a la EPN de cualquier acción legal que se derive por esta causa.
- Que el presente proyecto no ha sido presentado en ninguna convocatoria de otra institución pública o privada. El incumplimiento será causal para que el proyecto no sea tomado en consideración.
- Que todos los bienes adquiridos en proyecto permanecerán bajo la custodia y responsabilidad del director de proyecto durante la ejecución del mismo.
- Que si el proyecto genera algún producto o procedimiento susceptible de obtener derechos de propiedad intelectual, de los cuales se deriven beneficios, aceptamos que éstos serán compartidos entre los investigadores y la institución o las instituciones participantes en el proyecto, conforme a lo establecido en el COESC.
- Que el equipo de investigadores y/o instituciones participantes se comprometen a mantener la confidencialidad de la información si ésta podría ser susceptible de protección por patentes, y solicitar la valoración de propiedad intelectual respectiva previa a cualquier publicación o difusión.
- Que para el caso de derechos de autor otorgamos una licencia de uso exclusivo con fines académicos para la o las instituciones participantes en el proyecto.



Firma del Director del Proyecto
Nombre: Roberto Carlos Rojas Molina
C.I.:0502343148



DECLARACIÓN DEL JEFE DE DEPARTAMENTO

Esta propuesta ha sido aprobada y avalada por el Consejo del Departamento de⁵¹⁷....., en sesión del día 11.06.2019..... mediante resolución No. 001-11.06.2019

Las instalaciones, incluyendo personal, edificios, equipo y recursos financieros están a disposición del proponente y sus colaboradores de acuerdo con las especificaciones que se encuentran en esta propuesta.



Firma del Jefe del Departamento
Nombre: Jesús Portilla
C.I.: 0401024021