

ESCUELA POLITÉCNICA NACIONAL

FACULTAD DE INGENIERÍA QUÍMICA Y AGROINDUSTRIA

MAESTRÍA DE INVESTIGACIÓN EN METALURGIA

**TEMA: “DESARROLLO DE UN MÉTODO NUMÉRICO PARA PREDECIR EL
CRECIMIENTO DENDRÍTICO Y EFECTO DE LA CONVECCIÓN DURANTE LA
SOLIDIFICACIÓN DE METALES.”**

TESIS PREVIA A LA OBTENCIÓN DEL TÍTULO DE MAGISTER EN METALURGIA

CARLOS ESTEBAN VELOZ MUÑOZ
carlos.veloz01@epn.edu.ec

DIRECTOR: Ing. ROBERTO CARLOS ROJAS MOLINA, Ph.D
roberto.rojas@epn.edu.ec

CODIRECTOR: Ing. EDDY FERNANDO PAZMIÑO IBARRA, Ph.D
eddy.pazmino@epn.edu.ec

Quito, diciembre 2023

DECLARACIÓN DE AUTORÍA

Yo, **Carlos Esteban Veloz Muñoz**, declaro bajo juramento que el trabajo aquí descrito es de mi autoría; que no ha sido previamente presentado para ningún grado o calificación profesional; y, que he consultado las referencias bibliográficas que se incluyen en el documento.


Sin perjuicio de los derechos reconocidos en el primer párrafo del artículo 114 del Código Orgánico de la Economía de los Conocimientos, Creatividad e Innovación -COESC-, cedo los derechos patrimoniales de este trabajo, a la Escuela Politécnica Nacional



Carlos Esteban Veloz Muñoz

CERTIFICACION

Certificamos que el presente trabajo fue desarrollado por Carlos Esteban Veloz Muñoz, bajo mi supervisión.



Ing. Roberto Rojas, Ph.D.
DIRECTOR DE PROYECTO



Ing. Eddy Pazmiño, Ph.D.
CODIRECTOR DE PROYECTO

AUSPICIO

La presente investigación contó con el auspicio del proyecto Eliminación de contaminantes emergentes usando tecnologías de biofiltración basadas en compuestos desarrollados a partir de materiales de bajo costo y nanopartículas que se ejecutó en el Departamento de Ingeniería Mecánica de la Facultad de Ingeniería Mecánica

DEDICATORIA

Dedico este trabajo de investigación a mi familia, mi padre Dr. Carlos Veloz, mi madre Dra. María Muñoz, mi hermana Ab. Mishel Veloz, por ser un pilar fundamental en mi vida

Carlos

Desarrollo de un Método Numérico para Predecir el Crecimiento Dendrítico y Efecto de la Convección Durante la Solidificación de Metales.

Veloz Carlos¹

¹Escuela Politécnica Nacional, Facultad de Ingeniería Química, Quito, Ecuador

Resumen: En el presente estudio, se propone un método numérico para predecir el crecimiento dendrítico en dos dimensiones y el efecto de la convección en la solidificación de metales y/o aleaciones. Para lo cual se emplea el método “phase field” (PFM) o campo de fase, juntamente con el método de “lattice Boltzmann” (LBM). El método de “phase field” es usado para capturar la transformación de fase durante la solidificación del metal, mientras que el método de “lattice Boltzmann” se emplea para resolver el efecto del flujo de la parte líquida de la fundición, que en este caso ocurre como un proceso de convección forzada. La condición de no deslizamiento en la interfase sólido-líquido se satisface con una fuerza disipativa en LBM. Al método empleado en el estudio se lo denomina método “phase field-lattice Boltzmann” (PF-LBM). Simulaciones en dos dimensiones de la solidificación de una aleación de Al-Cu se realizan para analizar el efecto del flujo de fluido de la parte líquida de la fundición sobre el crecimiento dendrítico. Con respecto a estudios previos, el valor real de la viscosidad física de la aleación es utilizado en este trabajo para definir los valores adimensionales de viscosidad, incremento de tiempo y espacio que permitan obtener cálculos estables. Las simulaciones con diferentes valores de la velocidad de la mezcla fundida y concentración inicial de la aleación satisfactoriamente reproducen los patrones de crecimiento dendrítico. Además, la variación del tiempo de relajación en LBM efectivamente es una manera de optimizar los cálculos numéricos.

Palabras clave: crecimiento dendrítico, solidificación, método campo de fase “phase field” método “lattice Boltzmann”.

Development of a Numerical Method to Predict the Dendritic Growth and Convection Effect During Solidification of Metals.

Abstract: In the present study, a numerical method is proposed to predict two-dimensional dendritic growth and the effect of convection in the solidification of metals and/or alloys. For this purpose, the phase field method (PFM) is used together with the lattice Boltzmann method (LBM). The phase field method is used to capture the phase transformation during the solidification of the metal, while the lattice Boltzmann method is used to resolve the effect of the flow of the liquid part of the melt, which in this case of study is a forced convection process. The no-slip boundary condition at the solid-liquid interface is imposed by adding a dissipative force in LBM formulation. This method is called phase field-lattice Boltzmann method (PF-LBM). Two-dimensional calculations of the solidification of an Al-Cu alloy are carried out to analyze the effect of the fluid flow of the liquid part of the melt on the dendritic growth. Compared to previous studies, the real physical viscosity of the alloy is used in this study to define the dimensionless values of the viscosity, time and space increments that allow obtaining stable computations. The simulations with different values of melt flow velocity and initial concentrations of the alloy successfully reproduce the patterns of dendritic growth during solidification. Additionally, the variation of the relaxation time in LBM is an effective way to optimize the numerical computations.

To simulate the dendritic growth of an Al-Cu alloy, dimensionless values of viscosity, velocity and time are obtained to satisfy. The results obtained can be compared with other results.

Keywords: dendritic growth, solidification, phase field method, lattice Boltzmann method.

1. INTRODUCCIÓN

En el proceso de fundición de metales, la solidificación juega un rol importante para la formación de microestructuras. A nivel microscópico durante la solidificación de metales y aleaciones, persiste la presencia de estructuras dendríticas en los granos de la microestructura del metal. Estas formas son determinantes en las propiedades mecánicas que se presentan

en el producto final (Moreno et al., 2008). En aplicaciones específicas para ingeniería, las piezas obtenidas deben ser usadas sin tratamientos térmicos o tratamientos de conformado posteriores, y para que las propiedades mecánicas de las piezas no se vean afectadas durante la solidificación, el proceso debe ser controlado (Escamilla & López, 2016).

En la fundición las partes típicas solidificadas son en su mayoría estructuras columnares y equiaxiales. Durante las primeras etapas de solidificación, las estructuras columnares empiezan a crecer en las paredes del molde, por lo tanto, son inmóviles. Por su lado, el proceso de formación de estructuras equiaxiales se lleva a cabo en granos aislados de la fase líquida, por lo que estas estructuras crecen con el movimiento causado por el flujo de la mezcla líquida. Adicionalmente, la macro segregación que se encarga de la difusión de un metal a otro, se ve afectada por la diferencia de densidad de las fases sólida y líquida o una combinación de ambas. Esto repercute en la formación de lingotes de una aleación obtenidos por colado (Sakane et al., 2020). Para poder entender estos fenómenos multifísicos es indispensable el desarrollo de simulaciones numéricas computacionales.

Los métodos numéricos y el desarrollo asistido por computadora son indispensables para entender diferentes problemas relacionados con la ingeniería. Sin embargo, solo en años recientes gracias al desarrollo de equipos computacionales de gran capacidad, ha sido posible resolver múltiples dificultades inherentes al tratamiento matemático en el caso de la solidificación. La solidificación dendrítica es un proceso complejo que involucra además de los cambios de fase el efecto del movimiento de la mezcla fundida. El proceso puro de transformación de fase se da debido a un fenómeno difusivo, y en algunos casos es posible encontrar una solución analítica para describir la tasa de crecimiento de la fase sólida. Numéricamente, es posible encontrar además de la tasa de crecimiento, la forma de los patrones de solidificación durante la transformación de fases, debido a esto existen diversos métodos numéricos para estudiar la solidificación de metales. Entre los métodos disponibles más comunes para capturar el crecimiento dendrítico están: “front tracking method” (FTM), “level set method” (LSM) y “phase field method” (PFM). Al incluir la presencia de movimiento de la mezcla fundida promovido por la convección natural o forzada, y el consecuente movimiento de la interfase móvil, el estudio es más complejo y no existen soluciones analíticas para describir estos procesos (Dantzig & Rappaz, 2009). Por esta razón, es necesario recurrir a programas de simulación y algoritmos numéricos para estudiar la solidificación con estas características (Hurtado, 2002). En diversos estudios, la mezcla fundida se considera un flujo de un fluido incomprensible. Así, es posible predecir el movimiento de la mezcla fundida con una técnica tradicional de discretización de las ecuaciones de Navier-Stokes o el método de “lattice Boltzmann” (Rojas et al., 2015).

En este trabajo se propone utilizar un método numérico para predecir el efecto de la convección en el crecimiento dendrítico de metales. Este método es una combinación de PFM y LBM para el seguimiento de la transformación de fase y el flujo de la mezcla fundida, respectivamente. Para las simulaciones de solidificación, en este caso de estudio se ha seleccionado una aleación binaria de Al-Cu. Las propiedades físicas de la aleación se consideran en el modelo numérico y estas definen las escalas de los incrementos del tiempo y espacio para la solución de las ecuaciones. Los resultados son analizados en función del cambio de parámetros de las simulaciones como

velocidad de la mezcla fundida, concentración y el tiempo de relajación en LBM.

2. MARCO TEÓRICO/METODOLOGÍA

2.1. Solidificación

En el campo industrial, la fundición es considerada el proceso de manufactura más efectivo económicamente para la formación de partes con formas complejas. El rango de aplicación de la fundición es muy amplio. Por ejemplo, la formación de partes como cilindros, bloques de motor y pistones en el campo automotriz; o la formación de joyas en la joyería. En estos procesos es común utilizar un molde. Este molde consta de cavidades las cuales tiene la forma de la pieza que se desea obtener. El metal líquido fundido se vierte dentro del molde el cual extrae el calor del metal haciendo que se solidifique (Dantzig & Rappaz, 2009).

La solidificación o cristalización es un proceso donde los átomos del material pasan de un estado desordenado en una fase líquida, a un estado ordenado en una fase sólida. Este proceso es descrito y controlado por leyes cinéticas, las cuales proporcionan información sobre el movimiento de los átomos. Además, en la mayoría de los casos interviene una fuerza motriz la cual permite predecir la velocidad del proceso de solidificación (Fredriksson & Åkerlind, 2012). Un entendimiento de los mecanismos de solidificación y como son afectados por parámetros como la distribución de la temperatura, enfriamiento y aleantes es importante en el control de las propiedades de los procesos de fundición (Porter David et al., 2014). Adicionalmente, entre los fenómenos físicos que afectan al proceso de solidificación se tiene el flujo del metal líquido, flujo de calor del metal fundido y la transformación que ocurre de fase líquida a sólida en el metal (Barkhudarov & Barkhudarov, 1995).

2.2. Crecimiento dendrítico libre.

La gran mayoría de los cristales que crecen en las fundiciones y soluciones supersaturadas durante la solidificación, se tratan de estructuras en forma de dendritas (forma de árbol). Estas estructuras constan de un tronco principal y ramas laterales que se localizan a una distancia del vértice (Alexandrov & Galenko, 2021). Las ramificaciones de las dendritas pueden llegar a generar defectos altamente indeseables como micro segregaciones que pueden ser removidos con tratamientos térmicos adicionales (M. Glicksman, 1990). Por esta razón es necesario controlar el proceso de solidificación.

El crecimiento de dendritas inicia con la creación de estructuras cristalinas de un grupo de átomos, lo cual ocurre mediante fluctuaciones al azar. Si el grupo de átomos formados son muy pequeños para sobrevivir se los conocen como embriones, mientras que, al grupo de átomos que son lo suficientemente grandes para llegar a un estado estable se los conoce como núcleos. En este proceso la termodinámica juega un papel importante, ya que los átomos conglomerados son más abundantes y viables a medida que la temperatura desciende por debajo del punto de congelación de equilibrio (Dantzig & Rappaz, 2009). Los núcleos se pueden localizar en

las paredes del recipiente que contiene la mezcla fundida (crecimiento direccional) o en lugares alejados de las paredes (crecimiento libre). El crecimiento dendrítico libre se refiere al desarrollo no restringido de cristales dentro del metal fundido superenfriado (M. E. Glicksman, 1984). El estudio del crecimiento libre se enfoca en cómo evoluciona una partícula sólida aislada la cual se encuentra en un sistema infinito de fundición subenfriada (Dantzig & Rappaz, 2009).

Uno de los problemas que se tiene en la teoría del crecimiento dendrítico es la determinación de la tasa de crecimiento del vértice en los cristales y su radio de curvatura. Estos dependen del control de parámetros como: el subenfriamiento de la fundición o supersaturación de la solución, la concentración de la solución, la velocidad del flujo forzado, y/o la intensidad de la convección natural (Alexandrov & Galenko, 2021). Además, el cálculo exacto de la difusión y el efecto de la convección en el proceso de transformación de líquido a sólido es complicado debido a las formas complejas que se generan en la interfase sólido-líquido durante el crecimiento dendrítico (Boettinger et al., 2002).

2.3. Métodos numéricos

En el presente estudio se usa una combinación de dos métodos numéricos: “phase field method” (PFM), y “lattice Boltzmann method” (LBM) con un término forzado discreto para considerar la interacción sólido-líquido. La simulación del crecimiento dendrítico con un apropiado tratamiento de la interfaz entre la parte sólida y líquida es posible con PFM (Takaki et al., 2017). La ventaja de este método es la simplicidad al tratar cambios morfológicos de las microestructuras mediante el uso de la variable denominada campo de fase o parámetro de orden ϕ . Este parámetro ayuda a distinguir la fase sólida de la líquida y varía a lo largo del espesor finito de la interfaz, por lo cual, los cambios de la microestructura se describen mediante la evolución de ϕ en lugar de un seguimiento explícito de la interfaz (Rojas et al., 2022). Por otro lado, el efecto del fluido en la solidificación (convección) se resuelve con LBM (Rojas et al., 2015). El método de “lattice Boltzmann” presenta las siguientes ventajas en comparación con una solución de las ecuaciones de Navier-Stokes: en primer lugar, este método no requiere la solución de la ecuación de Poisson de presión que puede involucrar costos computacionales muy grandes; y, en segundo lugar, el método de “lattice Boltzmann” permite simulaciones en paralelo, mallas múltiples y pasos temporales para mejorar la eficiencia computacional de la simulación. A continuación, se presenta una explicación de los modelos y formulaciones numéricas.

2.3.1. Método de campo de fase o “phase field”

En esta sección se detallan las ecuaciones que gobiernan en método “phase field”. El incremento del tiempo y la longitud de la interfase se escalan con el tiempo de relajación τ_0 , y un espesor de la interfaz ω_0 , el parámetro ϕ que es el campo de fase define la fase sólida o líquida dependiendo del valor. Para la fase sólida ϕ toma el valor de +1 y -1 para líquido. La ecuación para la evolución de ϕ es dada por:

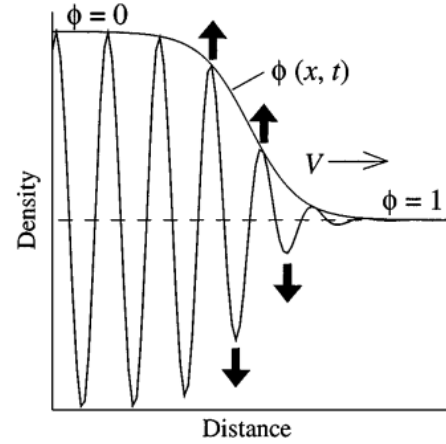


Figura 1. Representación de la variable de campo de fase o “phase field”

$$a_s(\theta)^2 \partial_t \phi = \nabla(a_s(\theta)^2 \nabla \phi) - \partial_x [a_s(\theta) a'_s(\theta) \partial_y \phi] + \partial_y [a_s(\theta) a'_s(\theta) \partial_x \phi] - f'(\phi) - \lambda * g'(\phi) u \quad (1)$$

Donde $a_s(\theta)$ representa la anisotropía en función del ángulo de orientación, $\theta a'_s(\theta) = \frac{da_s}{d\theta}$; $f'(\phi) = -\phi + \phi^3$ y $g'(\phi) = (1 - \phi)^2$ son funciones de interpolación que se asocian con el potencial y la energía libre del sistema, respectivamente; λ^* es un parámetro adimensional que controla el acoplamiento entre el campo de fase y la supersaturación, u . La supersaturación es definida por:

$$u = (C_L - C_L^e)/(C_L^e - C_S^e) \quad (2)$$

Donde C_L representa la concentración en la fase líquida, C_L^e y C_S^e son las concentraciones de equilibrio del líquido y sólido, respectivamente. Para la evolución temporal de la supersaturación u se usa la siguiente fórmula:

$$\frac{[1+k-(1-k)h(\phi)](\partial_t u + \mathbf{U} \cdot \nabla u)}{2} = \nabla [D_L q(\phi) \nabla u - \mathbf{j}_{AT}] + \frac{[1+(1-k)u]\partial_t h(\phi)}{2} - \nabla \cdot \mathbf{J} \quad (3)$$

Donde $k = c_s^e/c_L^e$ es el coeficiente de partición; $h(\phi) = \phi$ y $q(\phi) = (D_S + D_L + (D_S - D_L)\phi)/2D_L$ son funciones de interpolación; D_L y D_S representan las difusividades en el líquido y sólido; \mathbf{j}_{AT} se lo conoce como término de antiatrapamiento; \mathbf{J} es el flujo asociado con la fluctuación; \mathbf{U} es la velocidad del fluido. El tiempo de relajación τ_0 se expresa como $\tau_0 = a_2 \lambda W_0^2 / \Delta x$ (Echebarria et al., 2004). Las ecuaciones (1) y (3) se resuelven con el método de diferencias finitas (Echebarria et al., 2010) con una malla de espaciado Δx y un incremento en el tiempo Δt

2.3.2. Método de “lattice Boltzmann”

La convección puede cambiar drásticamente la forma de las dendritas en la solidificación. La mezcla fundida o fundición es considerada un fluido de dos fases: líquido y sólido. Para poder predecir los efectos de la convección y el flujo del fluido en la fundición se emplea el método de “lattice

Boltzmann” (LBM). LBM es una alternativa numérica a una solución con las ecuaciones de Navier-Stokes. En LBM, la ecuación gobernante describe la evolución temporal de una función de la distribución de velocidades considerando la naturaleza discreta de la materia a una escala mesoscópica. La integración temporal de esta ecuación es explícita y las cantidades macroscópicas como la velocidad y la densidad se definen en función de la distribución de la velocidad. Por estas consideraciones, la solución obtenida con LBM es mucho más simple que una discretización de las ecuaciones de Navier-Stokes (Rojas et al., 2022).

La ecuación gobernante del LBM con tiempo de relajación simple, τ , y término discreto forzado G_i que representa el efecto de fuerzas adicionales, se describe mediante la siguiente ecuación:

$$f_i(\mathbf{x} + \mathbf{c}_i\delta, t + \delta t) = f_i(\mathbf{x}, t) - \frac{1}{\tau} [f_i(\mathbf{x}, t) - f_i^{eq}(\mathbf{x}, t)] + G_i(\mathbf{x}, t)\delta t \quad (4)$$

En donde f_i representa la distribución de la velocidad de la partícula en la dirección i que está definida en modelos, \mathbf{x} es el vector posición, \mathbf{c}_i se define como la velocidad discreta de la partícula, t es el tiempo, δt el tamaño del paso temporal, y f_i^{eq} la función de equilibrio de distribución. Para encontrar la densidad del fluido ρ y la velocidad \mathbf{U} se usan las siguientes ecuaciones:

$$\rho = \sum_{i=0}^{Q-1} f_i \quad (5)$$

$$\rho \mathbf{U} = \sum_{i=0}^{Q-1} \mathbf{c}_i f_i \quad (6)$$

Donde Q es el número de velocidades discretas. En este trabajo se usa un modelo en dos dimensiones con 9 posibles velocidades de las partículas denominado D2Q9. El término discreto forzado, G_i con segundo orden de la velocidad viene representado por la siguiente ecuación:

$$G_i = \rho W_i \left[\frac{3(\mathbf{c}_i \cdot \mathbf{u})}{c^2} + \frac{9(\mathbf{c}_i \cdot \mathbf{u})^2}{c^4} \right] \cdot \mathbf{G} \quad (7)$$

Donde W_i es la función de peso relacionado con f_i^{eq} y c representa la velocidad de una partícula en su movimiento al siguiente nodo en LBM con incrementos de tiempo y espacio locales, así, $c = \frac{\delta x}{\delta t} = 1$. \mathbf{G} es una fuerza externa del sistema. En el presente estudio, la única fuerza que actúa en el flujo del fluido se relaciona con el arrastre que se genera en la fundición debido a la fase sólida. Para cuantificar esta fuerza se define la condición de borde de no deslizamiento en la interfase de sólido-líquido como una fuerza disipativa dada por la siguiente ecuación:

$$\mathbf{G}(\mathbf{x}, t) = 2\rho\nu g \left(\frac{1+\phi}{2} \right)^2 (\mathbf{U}_s - \mathbf{U}) \quad (8)$$

Donde ν es la viscosidad cinemática, g es una constante adimensional igual a 2.757, y \mathbf{U}_s es la velocidad del sólido. El movimiento de la parte sólida se resuelve con las ecuaciones definidas por la segunda ley de Newton para el movimiento:

$$\frac{M_s d\mathbf{U}_s}{dt} = \mathbf{G}_s \quad (9)$$

$$\frac{I_s d\boldsymbol{\omega}_s}{dt} = \mathbf{T}_s \quad (10)$$

Donde M_s es la masa del sólido y \mathbf{G}_s representa la fuerza total que actúa en el sólido, $\mathbf{G}_s = \sum \mathbf{x} \mathbf{G}(\mathbf{x}, t) \Delta V$. ΔV es el volumen de la celda computacional usada.

Resumiendo, a continuación, se explica un algoritmo del método numérico usado en el presente trabajo:

1. Inicialización de los parámetros de la simulación.
2. Resolución de las ecuaciones (1) y (3) para la transformación de fase y supersaturación, con el método de diferencias finitas.
3. Obtención de la velocidad de la mezcla fundida, \mathbf{U} , con LBM
4. Imposición de la condición de no deslizamiento con las ecuaciones (7) y (8)
5. Si es necesario, resolución de las ecuaciones (9) y (10) y actualización de la localización del campo de fase con la ecuación de advección.
6. Repetición de los puntos 2 al 5 hasta la final de la simulación.

2.3.3. Descripción del modelo matemático

El alcance del presente trabajo está limitado a la solidificación isotérmica de una aleación binaria en dos dimensiones. Sin embargo, este método es directamente aplicable a un problema tridimensional. En el modelo numérico se considera un dominio computacional rectangular donde existe una fundición supersaturada en estado líquido (flujo newtoniano e incompresible) y una fase sólida representado por un núcleo en el centro del dominio. El sólido es un cuerpo rígido sin deformación (Yamaguchi & Beckermann, 2013) (Takaki et al., 2017). La fuerza neta que ejerce el flujo del fluido en la solidificación hace que la dendrita pueda moverse (Feng & Michaelides, 2004; Glowinski et al., 2001). Sin embargo, en este estudio la fase sólida es estacionaria. Finalmente, una velocidad de flujo libre en la parte izquierda del dominio computacional define el movimiento de la mezcla fundida.

3. RESULTADOS Y DISCUSIÓN

3.1. Simulación de dendritas

En esta sección se desarrolla la simulación numérica para el análisis de la convección en el crecimiento dendrítico de una aleación de Al-Cu. Las propiedades físicas de la aleación se presentan en la Tabla 1. Además, la concentración inicial C_l de la aleación Al-Cu, se la mide en el rango de la concentración del diagrama de fases en equilibrio entre la línea de “liquidus” y “solidus” de la Figura 2. Los valores límite están definidos entre $C_{se} = 2.77 \times 10^{-3}$ en fracción atómica y $C_{le} = 1.98 \times 10^{-2}$ en fracción atómica para un valor de temperatura T_0 definido indirectamente por una supersaturación inicial.

Tabla 1. Propiedades de la aleación Al-Cu

Temperatura de fusión	$T_m [K]$	933.25
Difusividad en líquido	$D_l \left[\frac{m^2}{s} \right]$	3.0×10^{-9}
Difusividad en sólido	$D_s \left[\frac{m^2}{s} \right]$	3.0×10^{-13}
Coefficiente de partición	k	0.14
Viscosidad cinemática	$\nu \left[\frac{m^2}{s} \right]$	5.7×10^{-7}

Un esquema del dominio computacional se muestra en la Figura 3. El espaciado del mallado es el mismo en la dirección x e y. El tamaño es $W \times H$ de $400\Delta x \times 400\Delta x$, el núcleo está localizado en $(200\Delta x, 200\Delta x)$ y tiene un diámetro, D , que ocupa 6 espacios de la malla. El espaciado del mallado en la simulación Δx es $0.5 \mu m$ y su valor adimensional es $\frac{\Delta x}{w_0} = 0.8$. Las condiciones de borde se definen como: en el borde izquierdo de la malla se tiene un flujo de entrada uniforme U_0 , en el borde derecho se considera un flujo continuo de salida y en los bordes superior e inferior se tiene una condición de deslizamiento.

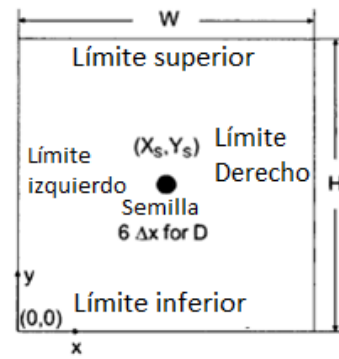


Figura 3. Dominio computacional para la simulación de dendritas

A continuación, se presentan los resultados de la simulación del crecimiento dendrítico para diferentes intervalos de tiempo de simulación, T_s y el respectivo tiempo de cálculo, T_c . Los parámetros numéricos de la simulación son los siguientes: $U_0 = 2 \times 10^{-3} m/s$, $\tau = 1$, $C_l = 0.013$ en fracción atómica. La viscosidad cinemática de la aleación define el incremento del tiempo para obtener simulaciones estables. Para esta aleación, este incremento del tiempo es extremadamente pequeño, por lo tanto, el crecimiento dendrítico es evidente en un tiempo de simulación prolongado como se muestra en la Figura 4. Estos patrones de solidificación efectivamente muestran el crecimiento dendrítico principal en las direcciones alineadas con el eje x y eje y, y ramificaciones secundarias en otras direcciones. El brazo frontal efectivamente crece más rápido que el brazo posterior debido a la acción del flujo de fluido. El crecimiento de los brazos principales superior e inferior no se ve mayormente afectado por el fluido. Con el propósito de analizar las características de los patrones de solidificación, en este estudio se optó en tomar un valor diferente para la viscosidad y variar el tiempo de relajación en LBM, τ ; la velocidad U_0 ; y la concentración inicial en la aleación C_l .

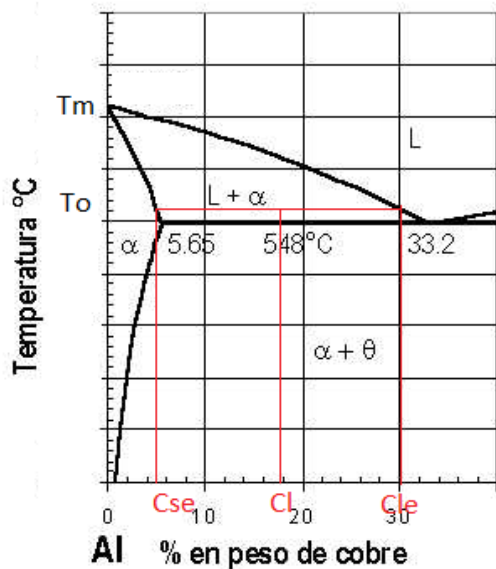


Figura 2. Diagrama de fases para la aleación Al-Cu

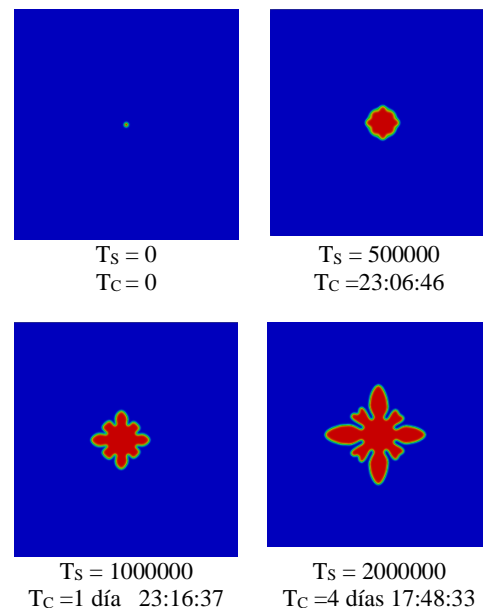


Figura 4. Evolución del crecimiento de dendritas a diferentes tiempos

3.1.1. Cambio del tiempo de relajación, τ

En esta sección se analiza la variación del parámetro de tiempo de relajación τ en LBM. Este parámetro adimensional puede ocasionar inestabilidad en el proceso de simulación dendrítico, pero a su vez es un mecanismo de optimización del tiempo de cálculo. Por ejemplo, si se toma valores muy pequeños cercanos a 0.5, la viscosidad numérica puede alcanzar un valor crítico cercano a cero que representaría un fluido sin viscosidad; mientras que para valores grandes como 2 se puede producir una inestabilidad en la simulación debido a que el incremento del tiempo no es suficiente para capturar los fenómenos físicos en la simulación. Para este trabajo, se evalúan los valores de 0.8, 1, 1.4 y 2. La velocidad de la mezcla fundida U_0 es $2 \times 10^{-3} m/s$, y la concentración inicial C_l es 0.013 en fracción atómica. Los resultados de estas simulaciones se detallan en las Figuras 5, 6 y 7.

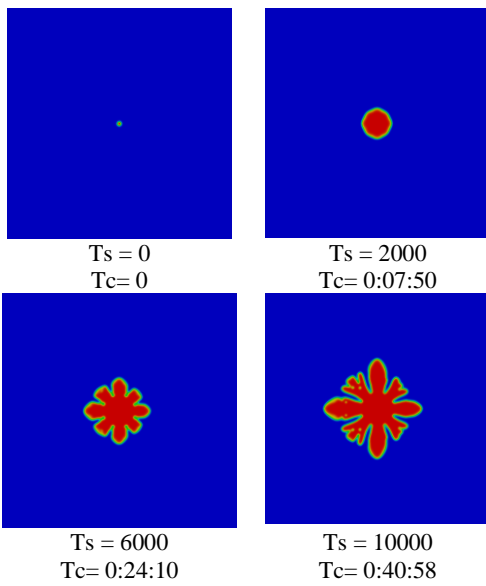


Figura 5. Crecimiento dendrítico con $\tau = 0.8$

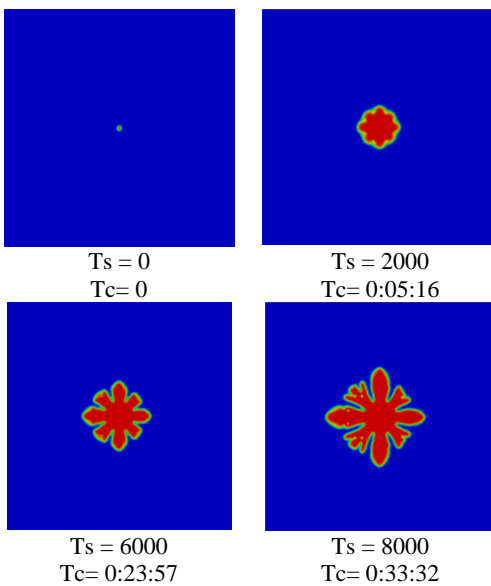


Figura 6. Crecimiento dendrítico con $\tau = 1$

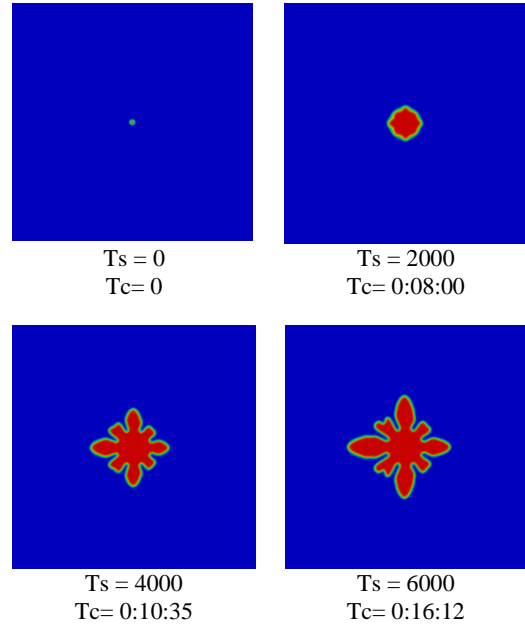


Figura 7. Crecimiento dendrítico con $\tau = 1.4$

Una vez simulado el crecimiento dendrítico para diferentes valores de τ , se puede notar como las ramificaciones secundarias de las dendritas se forman de mejor forma en τ igual a 0.8 y 1 que en el caso de $\tau = 1.4$. El incremento del tiempo de la relajación está relacionado directamente con el incremento del tiempo físico de las simulaciones y por eso los fenómenos físicos ocurren más rápido y no es posible capturar las formas en detalle. Para los tres casos, el crecimiento de los brazos principales es similar con un crecimiento favorable del brazo frontal en contacto con el fluido. Es importante notar que estas características comparables ocurren a distintos tiempos de simulación y cálculo. Al usar un tiempo de relajación más grande, las formas dendríticas se obtienen en menos intervalos de tiempo computacional. Por tanto, la variación de τ es un parámetro para optimizar el tiempo de los cálculos numéricos. Para un valor de τ igual a 2, la simulación es inestable y no es posible obtener resultados significativos. Este valor define el límite superior para la variación del tiempo de relajación en este tipo de simulaciones.

3.1.2. Cambio de la velocidad del fluido

En esta sección se evalúa la variación de la velocidad de la mezcla fundida. Tres valores de U_0 igual a $6 \times 10^{-4} m/s$, $1.37 \times 10^{-3} m/s$, $2 \times 10^{-3} m/s$ son analizados. Otros parámetros relevantes de la simulación se mantienen invariables como τ igual a 1 y la concentración inicial C_l igual a 0.013 en fracción atómica. Los resultados para las dos primeras velocidades se presentan en las Figuras 8 y 9, y los resultados del tercer caso simulado previamente están disponibles en la Figura 6.

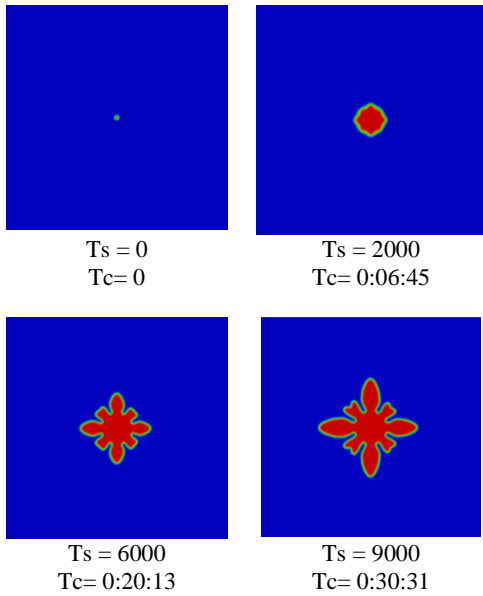


Figura 8. Crecimiento dendrítico con velocidad = 6×10^{-4} m/s

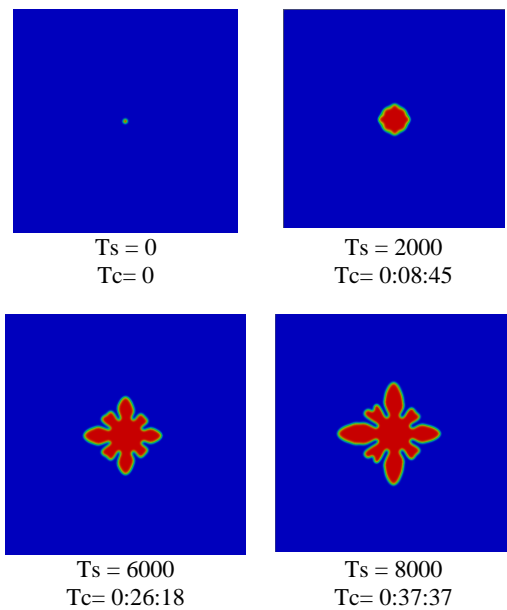


Figura 9. Crecimiento dendrítico con velocidad = 1.37×10^{-3} m/s

En este caso, para los valores de bajos de velocidad igual a 6×10^{-4} m/s y 1.37×10^{-3} m/s, se puede notar claramente el crecimiento de los cuatro brazos principales a lo largo del eje x y eje y. Las velocidades más altas en este caso 2×10^{-3} m/s favorecen el crecimiento de los ramales secundarios. También es notorio que, para obtener patrones similares de crecimiento dendrítico, es necesario mayores intervalos de simulación a velocidades bajas.

3.1.3. Cambio de la concentración inicial en la aleación

En esta sección se analiza la influencia del valor inicial de concentración en los patrones de solidificación. Los valores a

continuación se seleccionan en el rango definido por C_{se} y C_{le} : 0.011, 0.013 y 0.016 en fracción atómica. Los resultados para el valor inicial y final se representan en las Figuras 10 y 11, para el valor intermedio los resultados están disponibles en la Figura 6. Otros parámetros de la simulación se mantienen sin cambios.

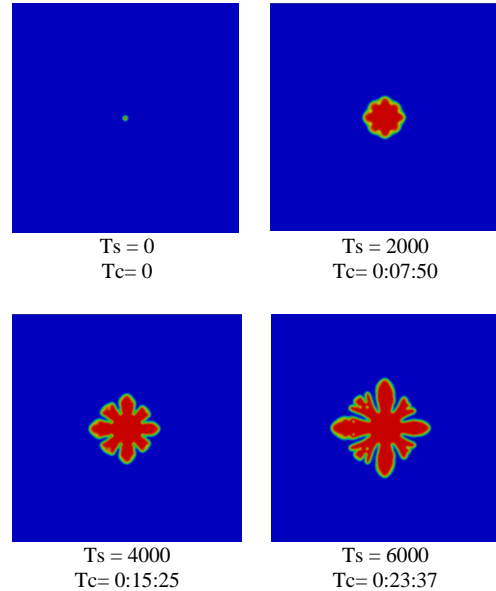


Figura 10. Crecimiento dendrítico con concentración inicial 0.011 en fracción atómica

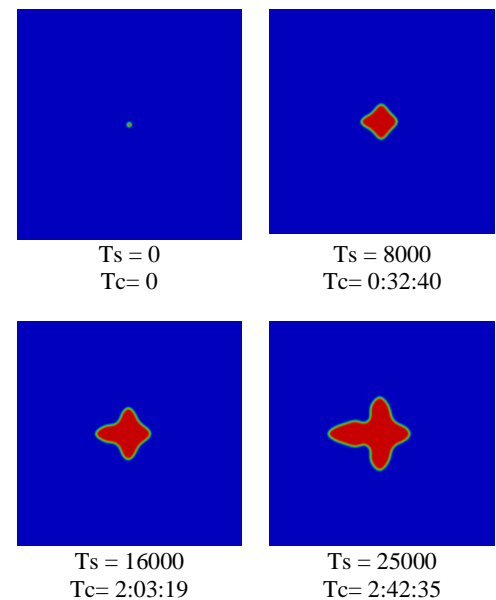


Figura 11. Crecimiento dendrítico con concentración inicial 0.016 en fracción atómica

Para el cambio de la concentración inicial, se puede notar que para concentraciones de 0.011 y 0.013 *en fracción atómica* las ramificaciones secundarias están bien definidas, así como también los brazos principales de la dendrita alineados con el eje x y eje y. La influencia de la mezcla fundida es similar para las dos concentraciones. Para una concentración inicial de 0.016 *en fracción atómica*, los brazos principales de la dendrita se forman lentamente y el efecto de las fluctuaciones que forman los brazos secundarios es casi nulo. En este caso se puede evidenciar que para concentraciones cercanas a la línea “liquidus” (Figura 2), el rango de variación de la concentración hasta el estado sólido es más largo y por tanto el proceso es más lento. Además, la influencia de la mezcla fundida es más importante y la tasa de crecimiento del brazo frontal comprado con los otros brazos es más grande.

En general, se puede notar como las dendritas que se encuentran alineadas con el flujo del líquido crecen más que las que no se encuentran alineadas. Este es el efecto de la convección forzada que favorece el crecimiento dendrítico a través del cambio de concentración del soluto, principalmente en la punta de los brazos.

4. CONCLUSIONES

En el presente estudio se ha aplicado el método de campo de fase o “phase field” y el método de “lattice Boltzmann” para predecir el crecimiento dendrítico de una aleación Al-Cu. Un estudio de la influencia de parámetros de la simulación se realizó en base a la variación del tiempo de relajación en LBM, velocidad de la mezcla fundida y concentración inicial. A partir de estas simulaciones se analizó el tiempo computacional y el intervalo de tiempo para cada simulación. Como resultado, se obtuvieron las siguientes conclusiones:

- Un tiempo de relajación τ igual a 1 es óptimo para capturar el efecto de la convección en la formación de dendritas y también para capturar el efecto de las fluctuaciones que favorece el crecimiento en los brazos alineados con el flujo.
- El incremento del tiempo de relajación es una herramienta para acelerar los cálculos numéricos, sin embargo, este incremento está limitado a valores que reproduzcan simulaciones estables
- Velocidades mayores de la mezcla fundida reflejan la condición lógica de mayor influencia sobre los patrones de solidificación. Consecuentemente, el crecimiento es más rápido en los brazos alineados con el flujo a mayores velocidades.
- El cambio de concentración inicial en la mezcla influye en la rapidez del proceso de solidificación. Para concentraciones cercanas al límite donde la aleación permanece en estado líquido, el proceso es lento porque la variación de la concentración hasta alcanzar la zona de estado sólido es más grande.
- Finalmente, a pesar de obtener resultados satisfactorios de la aceleración de los cálculos con la variación del tiempo de relajación en LBM, esto es insuficiente para representar una simulación real de solidificación. Por tanto, se recomienda utilizar técnicas de cálculos en

paralelo para extender el presente método a problemas físicos reales.

REFERENCIAS

- Alexandrov, D. V., & Galenko, P. K. (2021). A review on the theory of stable dendritic growth. In *Philosophical Transactions of the Royal Society A: Mathematical, Physical and Engineering Sciences* (Vol. 379, Issue 2205). Royal Society Publishing.
<https://doi.org/10.1098/rsta.2020.0325>
- Boettinger, W. J., Warren, J. A., Beckermann, C., & Karma, A. (2002). Phase-field simulation of solidification. In *Annual Review of Materials Science* (Vol. 32, pp. 163–194).
<https://doi.org/10.1146/annurev.matsci.32.101901.155803>
- Dantzig, J. A., & Rappaz, M. (2009). *Solidification*.
- Feng, Z. G., & Michaelides, E. E. (2004). The immersed boundary-lattice Boltzmann method for solving fluid-particles interaction problems. *Journal of Computational Physics*, 195(2), 602–628.
<https://doi.org/10.1016/j.jcp.2003.10.013>
- Fredriksson, H., & Åkerlind, U. (2012). *Solidification and Crystallization Processing in Metals and Alloys*.
www.wiley.com/go/fredriksson3
- Glicksman, M. (1990). *FUNDAMENTALS OF DENDRITIC GROWTH*.
- Glicksman, M. E. (1984). Free Dendritic Growth. In *Materials Science and Engineering* (Vol. 65).
- Glowinski, R., Pan, T. W., Hesla, T. I., Joseph, D. D., & Périaux, J. (2001). A Fictitious Domain Approach to the Direct Numerical Simulation of Incompressible Viscous Flow past Moving Rigid Bodies: Application to Particulate Flow. *Journal of Computational Physics*, 169(2), 363–426.
<https://doi.org/10.1006/jcph.2000.6542>
- Porter David, Easterling Kenneth, & Sherif Mohamed. (2014). *Phase Transformations in Metals and Alloys* (Third Edition).
- Barkhudarov, M. R., & Barkhudarov, M. R. (1995). *Computer Modelling of Solidification of Pure Metals and Alloys*. (Vol 1)
- Rojas, R., Sotomayor, V., Takaki, T., Hayashi, K., & Tomiyama, A. (2022). A phase field-finite difference lattice Boltzmann method for modeling dendritic growth solidification in the presence of melt convection. *Computers and Mathematics with Applications*, 114, 180–187.
<https://doi.org/10.1016/j.camwa.2022.03.043>
- Rojas, R., Takaki, T., & Ohno, M. (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*, 298, 29–40.
<https://doi.org/10.1016/j.jcp.2015.05.045>
- Takaki, T., Rojas, R., Sakane, S., Ohno, M., Shibuta, Y., Shimokawabe, T., & Aoki, T. (2017). Phase-field-lattice Boltzmann studies for dendritic growth with natural convection. *Journal of Crystal Growth*, 474,

146–153.

<https://doi.org/10.1016/j.jcrysgro.2016.11.099>

Yamaguchi, M., & Beckermann, C. (2013). Simulation of solid deformation during solidification: Compression of a single dendrite. *Acta Materialia*, *61*(11), 4053–4065.

<https://doi.org/10.1016/j.actamat.2013.03.030>

INFORMACIÓN SUPLEMENTARIA

PARTE 1: PARÁMETROS DE ENTRADA DE LA SIMULACIÓN NUMÉRICA

ANEXO No. 1

Parámetros de entrada:

Generales

Parámetro	Unidades	Valor	Descripción
imax jmax	-	401, 401	Número de puntos en el eje x y eje y
t_out	Intervalos	1000	Frecuencia de muestreo de datos numéricos
t_end	Intervalos	1000000	Tiempo máximo de la simulación

Método de campo de fase “phase field”

Parámetro	Unidades	Valor	Descripción
Δx	m	$5. \times 10^{-7}$	Tamaño del espaciamiento de malla
d_l	m ² /s	$3. \times 10^{-9}$	Difusividad en líquido
d_s	m ² /s	$3. \times 10^{-13}$	Difusividad en sólido
part	-	0.14d0	Coefficiente de partición
epsd	-	0.02	Magnitud de anisotropía
gito	Km	0.24×10^{-6}	Constante de Gibbs-Thomson
mmm	$\frac{K}{\text{fracción atómica}}$	-620	Pendiente de liquidus
c_inf	fracción atómica	0.011,0.013,0.016	Concentración inicial
tm_o	K	933.25	Temperatura de fundición
dsing	-	-0.2,-0.4,-0.5	subenfriamiento inicial

Valores no dimensionales

Parámetro	Unidades	Valor	Descripción
dx dy	-	0.8, 0.8	Tamaño de la malla en dirección x
ql	-	1	Difusividad en líquido
aap1	-	0.8839	Constante a1
aap2	-	0.6267	Constante a2
xsi	-	1	Parámetro de antiatrapamiento
gomi	-	2×10^{-4}	gomi para phi
Sr	-	3	Tamaño de semilla

Método de “lattice Boltzmann”

Parámetro	Unidades	Valor	Descripción
rho0	-		rho0
u0	m/s	0.0001, 0.0002, 0.0003	Velocidad física
v0	m/s	0	Velocidad inicial
phi0	-	0.8,1.0, 1.4, 2.0	Tiempo de relajación
nyu	m ² /s	5.7×10^{-9} 2.5×10^{-9}	Viscosidad
forceorder	-	2	Orden de fuerza

PARTE 2: PARÁMETROS FÍSICOS CALCULADOS CON LOS DATOS DE ENTRADA

ANEXO No. 2

Parámetros calculados:

Método de campo de fase “phase field”

Parámetro	Unidades	Valor	Descripción
cle	<i>fracción atómica</i>	1.9298245614035085 x 10 ⁻² 1.9817073170731708 x 10 ⁻² 1.9817073170731708 x 10 ⁻² 1.9817073170731708 x 10 ⁻² 1.9817073170731708 x 10 ⁻² 1.9298245614035085 x 10 ⁻² 1.9323671497584540 x 10 ⁻² 1.9817073170731708 x 10 ⁻²	Concentración en línea liquidus
cse	<i>fracción atómica</i>	2.7017543859649122 x 10 ⁻³ 1.9817073170731708 x 10 ⁻² 2.7743902439024393 x 10 ⁻³ 2.7743902439024393 x 10 ⁻³ 2.7743902439024393 x 10 ⁻³ 2.7017543859649122 x 10 ⁻³ 2.7053140096618359 x 10 ⁻³ 2.7743902439024393 x 10 ⁻³	Concentración en línea solidus
d_0	m	2.3324012821387167 x 10 ⁻⁸ 2.2713370650354893 x 10 ⁻⁸ 2.2713370650354893 x 10 ⁻⁸ 2.2713370650354893 x 10 ⁻⁸ 2.2713370650354893 x 10 ⁻⁸ 2.3293323330832708 x 10 ⁻⁸ 2.3293323330832708 x 10 ⁻⁸ 2.2713370650354893 x 10 ⁻⁸	Longitud del capilar
qs, (Ds*)	-	9.999999999999991 x 10 ⁻⁵	Difusividad en sólido
ddd*	-	3.7318420514219471 x 10 ⁻² 3.6341393040567833 x 10 ⁻² 3.6341393040567833 x 10 ⁻² 3.6341393040567833 x 10 ⁻² 3.7318420514219471 x 10 ⁻² 3.7318420514219471 x 10 ⁻² 3.7269317329332335 x 10 ⁻² 3.6341393040567833 x 10 ⁻²	Longitud del capilar
lamda	-	23.685353983918127 24.322127635924797 23.716559983896939	Magnitud de la fuerza impulsora
diffc	-	14.843611341721491 15.242677389434071 14.863168141908213 14.863168141908213	Coefficiente de difusión
dt1*	-	8.6232384460394520 x 10 ⁻³ 8.3974748483968530 x 10 ⁻³ 8.6118920796630846 x 10 ⁻³	Paso de tiempo para la estabilidad
epsd1	-	0.9399999999999995	
epsd2	-	8.5106382978723402 x 10 ⁻²	
w0	m	6.249999999999995 x 10 ⁻⁷	Espesor de interfaz
tau0	s	1.9327618934533188 x 10 ⁻³ 1.9847236184158943 x 10 ⁻³ 1.9327618934533188 x 10 ⁻³ 1.9353083518109649 x 10 ⁻³	Tiempo de relajación
dt1	s	1.6666666666666664 x 10 ⁻⁵ 1.6666666666666667 x 10 ⁻⁵	Incremento en tiempo
uphysical	m/s	2.999999999999997 x 10 ⁻⁴	Velocidad dimencinal

tau	-	0.8, 1.0, 1.4, 2.0	Tiempo de relajación
-----	---	--------------------	----------------------

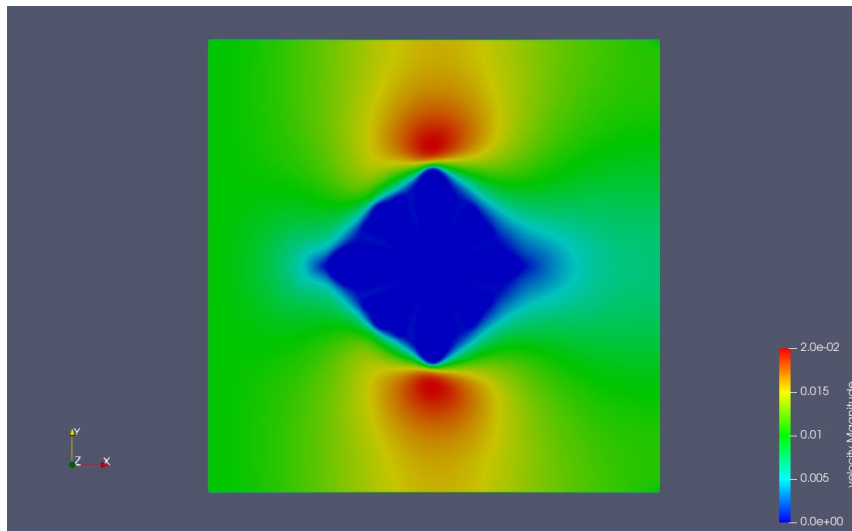
Método de “lattice Boltzmann”

Parámetro	Unidades	Valor	Descripción
nyu*	-	0.1666666666666671 0.3000000000000004 0.5000000000000011 0.1666666666666671	Viscosidad no dimensional
dt2	s	1.666666666666671 x 10 ⁻⁵ 3.000000000000001 x 10 ⁻⁵ 5.000000000000002 x 10 ⁻⁵ 7.3099415204678373 x 10 ⁻⁸	Incremento de tiempo para estabilidad
dt	s	1.666666666666664 x 10 ⁻⁵ 1.666666666666667 x 10 ⁻⁵ 7.3099415204678373 x 10 ⁻⁸	Incremento de tiempo
dt*	-	8.6232384460394520 x 10 ⁻³ 8.3974748483968530 x 10 ⁻³ 8.6232384460394520 x 10 ⁻³ 8.6118920796630846 x 10 ⁻³ 3.6831030036828310 x 10 ⁻⁵	Incremento de tiempo en phase field
u0	-	9.999999999999985 x 10 ⁻³ 3.333333333333335 x 10 ⁻³ 6.666666666666671 x 10 ⁻³ 1.000000000000000 x 10 ⁻² 4.3859649122807021 x 10 ⁻⁵	velocity non dimensional

PARTE 3: GRAFICAS DE VELOCIDAD

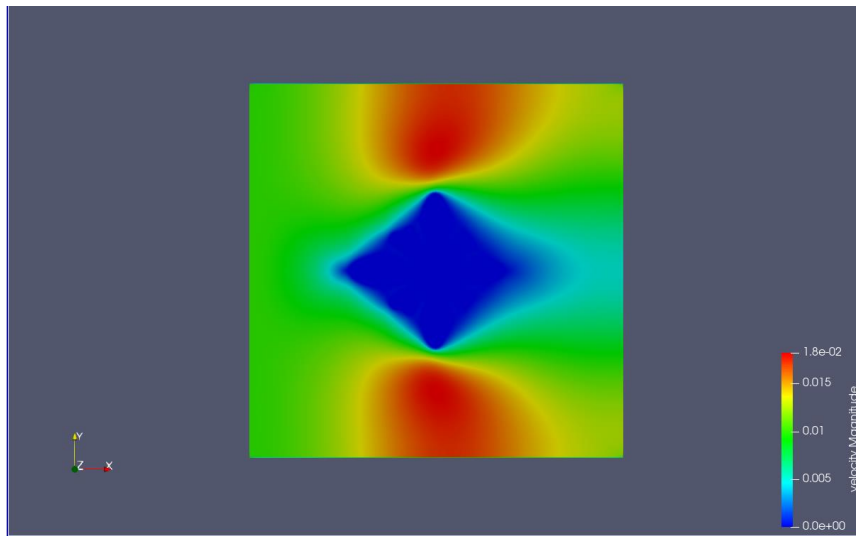
ANEXO No. 3

Tiempo de relajación $\tau=1$



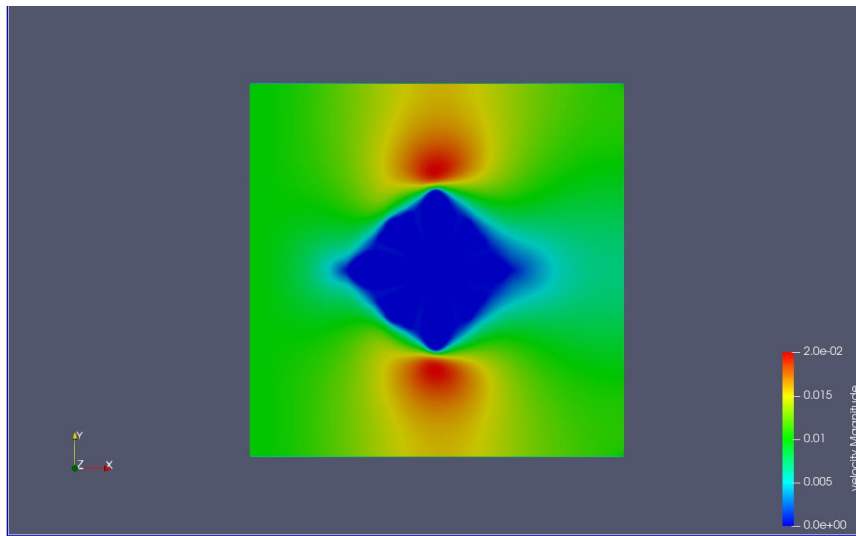
ANEXO No. 4

Tiempo de relajación $\tau=1.4$



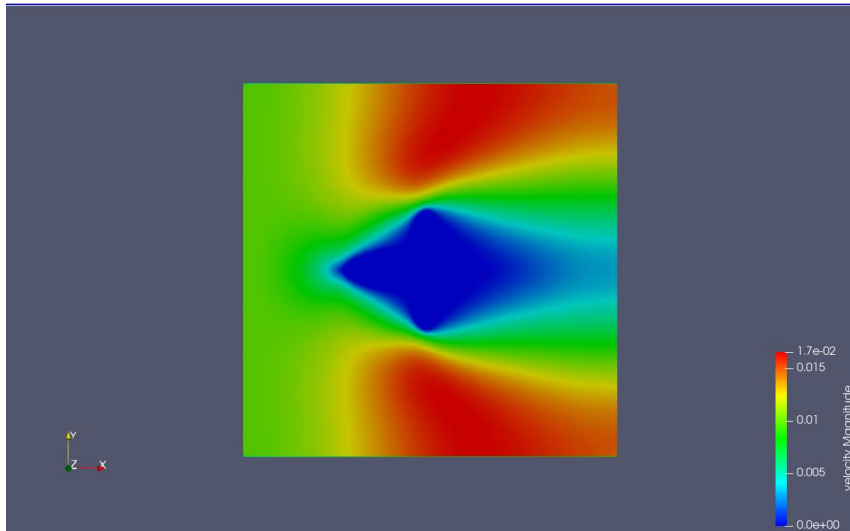
ANEXO No. 5

Velocidad igual a $6 \times 10^{-4} \text{ m/s}$



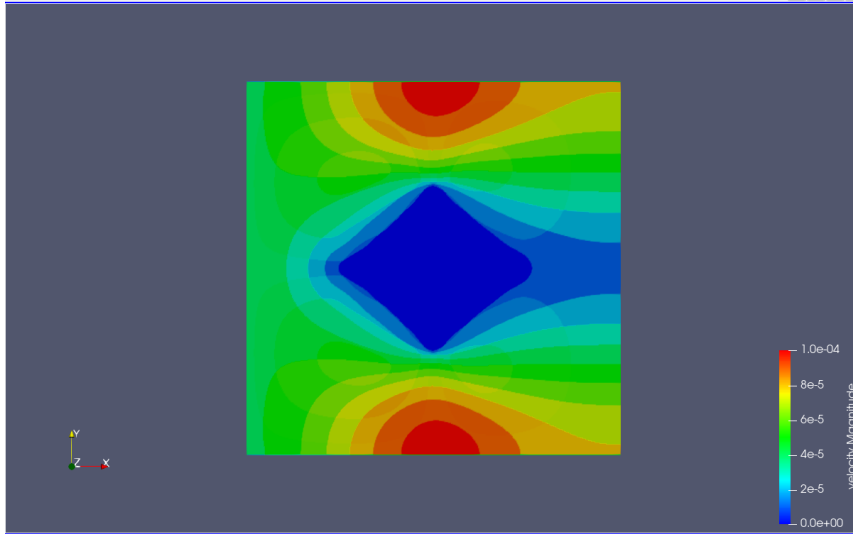
ANEXO No. 6

Velocidad igual a $1.37 \times 10^{-3} \text{ m/s}$



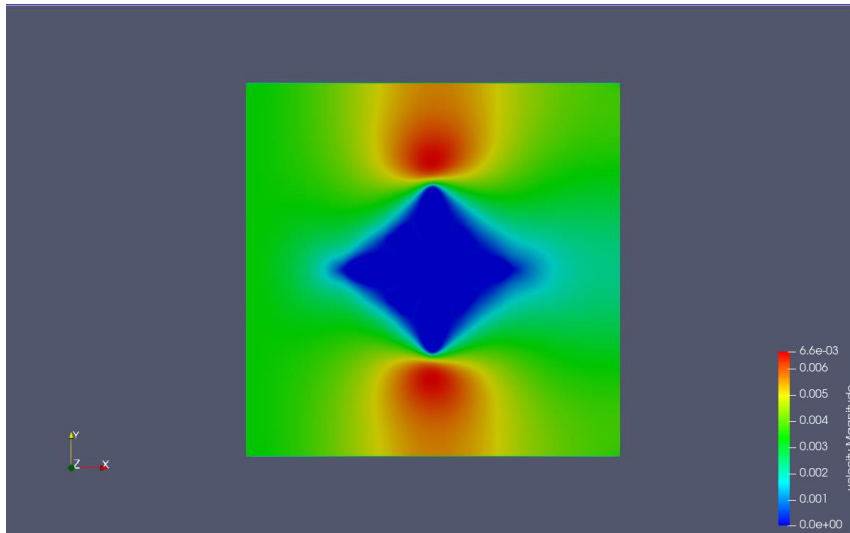
ANEXO No. 7

Velocidad igual a $2.05 \times 10^{-3} \text{ m/s}$



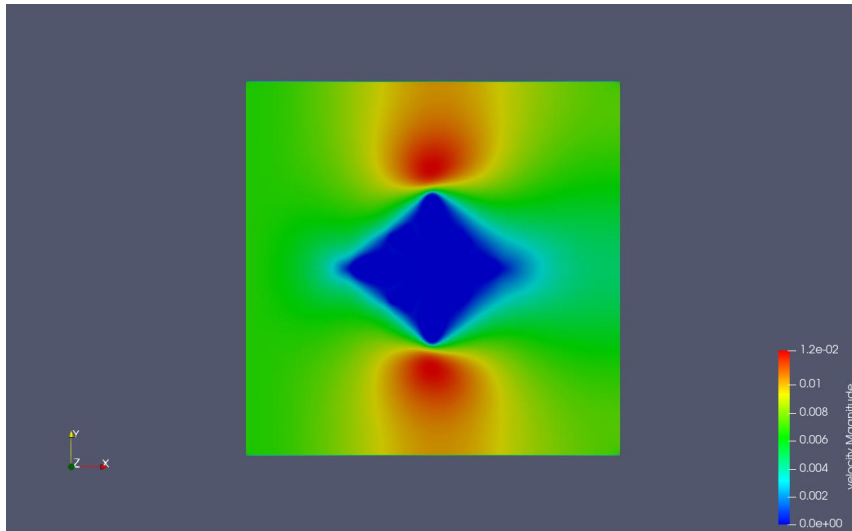
ANEXO No. 8

Concentración igual a 0.011 At * Frac



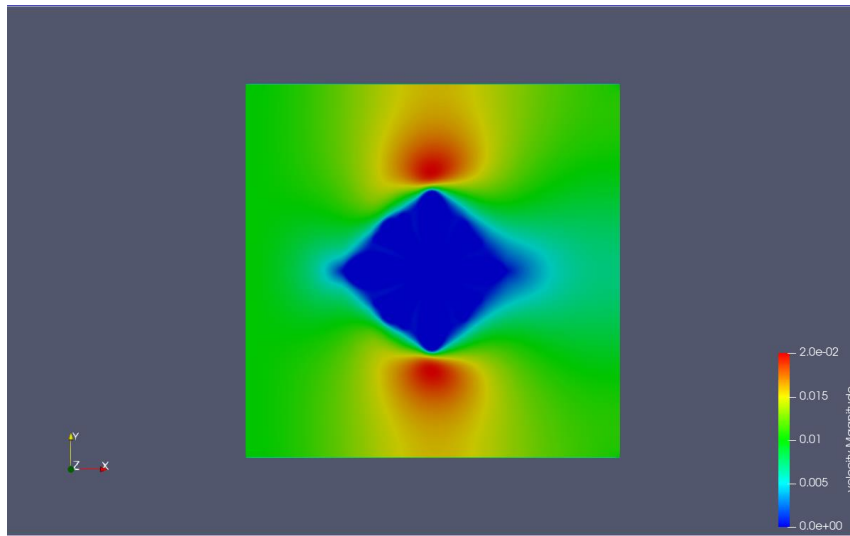
ANEXO No. 9

Concentración igual a $0.012 \text{ At} * \text{Frac}$



ANEXO No. 10

Concentración igual a $0.013 \text{ At} * \text{Frac}$



ANEXO No. 11

Concentración igual a $0.013 \text{ At} * \text{Frac}$, Parámetro de relajación $\tau=1$, viscosidad $5.7 \times 10^{-7} \frac{\text{m}^2}{\text{s}}$

