

**Modelización numérica de la interacción de partículas
con interfases de solidificación (*)**

por Ing. Eliana Mabel Agaliotis

Directores

**Dr. Carlos Enrique Schvezov
Dra. Alicia Esther Ares**

**(*)Tesis para optar al título de *Doctora en Ciencia y Tecnología, Mención
Materiales***

República Argentina

2011

Agradecimientos

Un trabajo de investigación es siempre fruto de ideas, proyectos y esfuerzos que corresponden a varias personas que aportan su colaboración desinteresada.

En primer lugar deseo expresar mi agradecimiento a los directores de esta tesis doctoral, Dr. Carlos Schvezov y Dra. Alicia Ares, por la orientación y guía que han brindado en la realización de este trabajo. Gracias por la confianza ofrecida.

Se agradece a todas las personas e instituciones que hicieron posible la realización del trabajo, especialmente al Consejo Nacional de Investigaciones Científicas y Técnicas (CONICET), institución que me otorgó una beca doctoral.

Además quiero agradecer a los directivos del Instituto de Tecnología “Jorge Sabato”. A la Dra. Alicia Sarce por el estímulo constante durante estos cinco años.

Quiero agradecer muy especialmente al Dr. Mario Rosenberger por sus correcciones y sugerencias, por su acompañamiento continuo, su tiempo y sus ideas en la confección de esta tesis que le otorgan el lugar de co-director honorario.

Asimismo, agradezco a mis compañeros del Programa de Materiales Modelización y Metrología Miguel Ángel Alterach, Pablo Favilla y especialmente a María Laura Vera por sus opiniones y colaboración desinteresada.

A mis compañeros de Doctorado que me ayudaron y acompañaron en este largo camino. Por la amistad que fuimos construyendo durante estos años

quiero agradecer en forma especial a Paula, Iván, Lola, Miguel Ángel, Fernanda, Marcos, Manuel, Pablo, Rodolfo y a todos los que compartieron alguna materia con nosotros.

Pero un trabajo de investigación es también fruto del reconocimiento y del apoyo vital que nos ofrecen las personas que nos estiman, sin el cual no tendríamos la fuerza y energía que nos anima a crecer como personas y como profesionales.

Gracias a mi familia, a mis padres, a mi hermano, mi abuela, por su apoyo constante y valioso.

Gracias a mis amigos, que siempre me han prestado un gran apoyo moral y humano, necesarios en los momentos difíciles de este trabajo y esta profesión.

A todos, muchas gracias.

Eliana Mabel Agalotis

Marzo de 2011

Resumen

Se analiza el fenómeno de repulsión mediante modelos numéricos y analíticos de la interacción entre una interfase de solidificación y una partícula esférica, considerando un equilibrio dinámico entre las fuerzas de arrastre y las de repulsión.

Ambas fuerzas son calculadas por separado y luego combinadas para obtener el valor de equilibrio. La fuerza de arrastre sobre la partícula se calculó utilizando la dinámica de fluidos computacional en función de la velocidad de solidificación, el radio de la partícula y la separación partícula-interfase. La fuerza de repulsión se calculó utilizando la ecuación de Lifshitz van der Waals integrando numéricamente en función de la forma y la separación de la interfase.

El modelo es aplicado a materiales que solidifican conteniendo partículas metálicas con conductividades térmicas iguales, menores y mayores que la matriz, que resultan en interfases de solidificación planas, convexas y cóncavas respectivamente. El fenómeno de repulsión se analiza considerando diferentes velocidades de solidificación y tamaño de partículas.

Se comparan las fuerzas de arrastre obtenidas a partir de las interfases planas, convexas y cóncavas. La forma de las interfases convexas y cóncavas se obtiene a partir de las simulaciones del campo térmico. Los resultados muestran que una interfase cóncava genera fuerzas de arrastre, hasta un orden de magnitud mayor que una interfase plana a una misma separación partícula-interfase, mientras que una interfase convexa genera menores fuerzas de arrastre que una interfase plana.

A partir de los cálculos de las condiciones de equilibrio, se encontró que la velocidad crítica para una interfase cóncava es mayor que para una

interfase plana, mientras que una interfase convexa presenta menor velocidad crítica que una interfase plana a una misma distancia y un mismo radio de partícula.

De la comparación con los resultados experimentales se concluye que se puede predecir el rango de velocidades de solidificación en el cual se produce el estado estacionario de repulsión.

Abstract

The interaction between the solidification front and a spherical particle was modeled and simulated in order to study the phenomenon of "pushing". This phenomenon is governed by a dynamic balance between drag and repulsion forces.

Both forces are calculated separately and then combined to obtain the equilibrium position. Using computational fluid dynamics, the drag force on the particle is calculated as a function of the solidification rate, the radius of the particle and the particle-interface separation. The repulsion force is calculated using the Lifshitz-van der Waals equation and numerically integrated in terms of the shape and separation of the interface.

The model is applied to a metallic matrix containing particles with similar, lower or higher thermal conductivities than the matrix, resulting in planar, convex and concave interfaces, respectively. For each case the process is simulated at different solidification rates and particle sizes.

Drag forces obtained from the planar interfaces, convex and concave were compared. The shape of the convex and concave interfaces is previously calculated from simulations of the thermal field. The results show that a concave interface gives higher drag forces, about one order of magnitude larger, than those for a planar interface, while a convex interface give lower drag forces than those for a planar interface.

From the calculations of the equilibrium conditions, we found that the critical velocity for a concave interface is higher than for a flat interface, while a convex interface has lower critical speed than a flat interface at the same distance and the same particle radii.

The simulated results were compared with experiments and a good agreement was found. Then, it could be concluded that this model give satisfactory predictions of the solidification speed in which the steady-state of pushing occurs.

Índice temático

Contenido

Agradecimientos	II
Resumen.....	IV
Abstract	VI
Índice temático	VIII
Lista de símbolos.....	XII
Capítulo 1 Introducción.....	1
Capítulo 2 Marco teórico y revisión bibliográfica	3
2.1 Definición del problema	3
2.2 Fuerzas que actúan sobre la partícula.....	4
2.3 Aproximaciones del modelo de repulsión.....	8
2.4 Simulaciones numéricas del modelo de repulsión	14
2.5 Comparación con resultados experimentales	16
Capítulo 3 Objetivos.....	25
Capítulo 4 Formulación del modelo.....	27
4.1 Modelo térmico.....	29
4.1.1 Modelo térmico, cilindro infinito	31
4.1.2 Modelo térmico axi-simétrico	33
4.2 Modelo de flujo de fluidos.....	35
4.2.1 Modelo de flujo de fluidos tridimensional.....	36
4.2.2 Modelo axi-simétrico.....	37
4.2.2.1. Interfase plana	39
4.2.2.2. Interfase cóncava	40

4.2.2.3. Interfase convexa	41
4.3 Modelos analíticos	42
4.3.1 Modelo para el cálculo de las fuerzas de arrastre de una interfase plana.....	42
4.3.2 Modelo para el cálculo de las fuerzas de repulsión en función de la forma de la interfase.....	42
Capítulo 5 Resultados	45
5.1 Análisis de sensibilidad de los modelos.....	45
5.1.1 Comparación entre los modelos de simetría axial para partícula esférica y cilindro infinito.....	46
5.1.2 Comparación entre tamaños de malla y entre pasos de tiempo para el modelo térmico.....	49
5.1.3 Comparación entre los modelos de simetría axial y tridimensional	55
5.1.4 Refinamiento de malla para el modelo de flujo de fluidos	58
5.2 Forma de la interfase de solidificación	65
5.2.1 Influencia de las Velocidades de Extracción de Calor en la Determinación de la Forma de la Interfase	65
5.2.2 Influencia del tamaño de partícula en la forma de la interfase	67
5.2.3 Influencia de la conductividad térmica en la forma de la interfase	69
5.2.4 Influencia de la forma de la partícula en la forma de la interfase	72
5.3 Modelo de flujo de fluidos.....	76
5.3.1 Interfase plana	76
5.3.2 Interfase cóncava	84
5.3.3 Interfase convexa	88
5.3.4 Comparación entre los resultados de las fuerzas de arrastre obtenidas para las interfases plana, cóncava y convexa	92
5.4 Modelo de fuerzas de repulsión	95
5.4.1 Interfase plana	96
5.4.2 Interfase cóncava	97
5.4.3 Interfase convexa	99
5.4.4 Comparación entre interfases cóncava, plana y convexa.....	100

Capítulo 6 Análisis y discusión.....	105
6.1 Análisis de curvas de equilibrio en función del tamaño y forma de la interfase	105
6.1.1 Caso de interfase plana.....	106
6.1.2 Caso de interfase cóncava.....	115
6.1.3 Caso de interfase convexa	116
6.2 Comparación de los valores de equilibrio obtenidos de las simulaciones con los resultados experimentales	118
Capítulo 7 Conclusiones	127
Referencias Bibliográficas	129

Lista de símbolos

F_R	Fuerza de repulsión
F_a	Fuerza de arrastre
F_g	Fuerza gravitacional
F_0	Fuerza necesaria para acelerar el fluido adherido a la partícula
m	Masa de la partícula
$\frac{dV_p}{dt}$	Aceleración de la partícula
R	Radio de la partícula,
h	Distancia partícula-interfase situada sobre el eje perpendicular a la interfase que cruza por el centro de la partícula
h_0	Mínima distancia entre la partícula y la interfase
k^*	Factor de forma de la interfase
$\Delta\gamma_0$	Cambio de energía libre interfacial cuando la distancia partícula-interfase es mínima
$\Delta\gamma$	Cambio de energía libre debida a la tensión superficial
γ_{PS}	Energía interfacial entre la partícula y el sólido
γ_{PL}	Energía interfacial entre la partícula y el líquido
γ_{SL}	Energía interfaciales entre el sólido y el líquido
r	Distancia desde el eje perpendicular a la interfase sólido-líquida hasta la interfase sólido-líquida
$h(r)$	Separación entre la interfase y la partícula
B_3	Constante efectiva de Hamaker
A	Constante de Hamaker
V_c	Velocidad crítica
Ω	Volumen atómico,
D	Coeficiente de difusión para la matriz líquida en la región entre

	la partícula y el sólido,
k_b	Constante de Boltzman,
T	Temperatura
L	Calor latente por unidad de volumen
a_0	Definida a partir de la relación modificada de Gibbs Thompson para el cambio de energía libre: $L(a_0/\rho_{int})$, siendo $1/\rho_{int}$ la curvatura de la interfase.
μ	Viscosidad dinámica del líquido
k_p	Conductividad térmica de la partícula
k_L	Conductividad térmica del líquido.
ξ	Factor de corrección por la curvatura de la interfase
c_p	Calor específico de la partícula
c_L	Calor específico del líquido
ρ_p	Densidad de la partícula
ρ_L	Densidad del líquido
R_{int}	Radio de curvatura de la interfase.
α	Factor de corrección por la curvatura de la interfase
G	Gradiente de temperatura
ΔS	Entropía de fusión.
ρ	Densidad,
t	Tiempo,
u	Velocidad,
σ_{ij}	Tensor de tensiones,
f_i	Fuerza por unidad de masa ,
p	Presión,
τ_{ij}	Tensor de tensión desviadora,
δ_{ij}	Delta de Kronecker,

ε_{ij}	Tensor de velocidad de deformación,
k	Conductividad térmica
Q	Generación de calor.
$F_{aStokes}$	Fuerzas de arrastre de Stokes
F_{aS-M}	Fuerzas de arrastre de Stokes-Modificado
V_{int}	Velocidad de la interfase,
$V_{c(agua)}$	Velocidad crítica en agua,
$V_{c(sim)}$	Velocidad crítica simulada,
μ_{agua}	Viscosidad del agua
μ_{sim}	Viscosidad simulada.
$F_{viscosa}$	Fuerza viscosa

Subíndices especiales

i o j	Representan las coordenadas espaciales; valen 1 o 2 cuando el modelo es en dos dimensiones o axi-simétrico, valen 1, 2 o 3 cuando el modelo es tridimensional
$,j$ o $,i$	La coma implica derivada parcial respecto a la coordenada espacial indicada por j o i .

Capítulo 1 Introducción

Durante la solidificación de materiales con partículas inmersas en el seno de un material fundido pueden ocurrir interacciones entre las partículas y el frente de solidificación. Se observó que para algunos sistemas partícula-sólido-líquido, las partículas pueden ser repelidas o atrapadas por una interfase que avanza. El fenómeno de repulsión ha sido estudiado tanto en forma experimental como teórica por diversos autores [1-5]. Los modelos teóricos que predicen la repulsión de partículas en un sistema específico utilizan valores de energías superficiales entre la partícula sólida y la matriz sólida, en general disponibles en la literatura para casos limitados. Ya sea que se trate de repulsión o atrapado, se requiere incluir las fuerzas microscópicas que interactúan durante el proceso transitorio que conduce al estado estacionario de repulsión o atrapado. Estas fuerzas deben ser de corto alcance e involucrar tres elementos: la partícula, una película de fluido y el sólido. Si los efectos térmico fueran determinantes en la repulsión de partículas, óxidos o materiales cerámicos con una baja conductividad serán repelidos en casi cualquier metal y, por otro lado, cualquier partícula metálica tenderá a ser atrapada. Esto no ocurre en todos los sistemas.

El estudio de los aspectos que ocurren durante este fenómeno como el de la conductividad térmica de los constituyentes del sistema (partícula material base), y la forma de las partículas, permitirá aportar con conocimiento sobre el proceso y su utilización para aplicarlo en los diferentes procesos de solidificación y cristalización de materiales biológicos, compuestos o aleaciones industriales.

En esta investigación se modeló y simuló la interacción entre una interfase de solidificación y una partícula esférica, inmersa en el material fundido, teniendo en cuenta que este fenómeno está regido por un equilibrio

dinámico entre fuerzas de arrastre y repulsión que se manifiestan sobre la partícula.

Existe más de un mecanismo o interacción que puede crear una fuerza de repulsión entre la partícula y el sólido que conduzcan a la repulsión. En la presente investigación, en el caso de un estado estacionario de repulsión, se consideran dos fuerzas principales; la de arrastre (F_a) y la de repulsión (F_r) que se encuentran en equilibrio. El fenómeno depende de las propiedades, la naturaleza y la morfología de la partícula, el fundido, el sólido y los campos externos.

Los modelos matemáticos desarrollados incluyen las condiciones en el sistema que puedan producir interfaces planas, cóncavas y convexas.

Los campos térmicos y de fluidos fueron desacoplados. El campo térmico y la morfología de la interfase están principalmente determinados por los valores de las conductividades térmicas de la partícula, el líquido y el sólido. Las fuerzas de arrastre y de repulsión, fueron calculadas por separado y luego combinadas para obtener el valor de equilibrio.

Los resultados incluyen el efecto de la conductividad térmica en la configuración geométrica del sistema partícula-interfase que modifican la velocidad de solidificación a partir de la cual la partícula es atrapada por el sólido y las condiciones de equilibrio responsables de la repulsión estacionaria de las partículas.

Referencias

1. M. V. Pikunov, The behavior of suspended impurities during crystallization. Non ferrous metals, their treatment and working (Moscow: Metallurgizdat, 1957), 56-67.
2. D. R. Uhlmann, B. Chalmers and K. A. Jackson, "Interaction between particles and a solid-liquid interface", J. Applied Physics, 35 (1964), 2986-2993
3. S.N. Omenyi, A.W. Neumann. "Thermodynamic Aspects of Particle Engulfment by Solidifying Melts", J. Appl. Phys, 47 (1976), 3956-3962.
4. A. A. Chernov, D. E. Temkin, S. M. Mel'nikova. "Theory of the capture of solid inclusions during the growth of crystals from the melt", Sov. Phys. Crystallogr., 21(4) (1976), 369-379.
5. J. Cisse and G. F., Bolling, "A theory for the interaction of particles with a solidifying front", J. of Crystal Growth, 10 (1971), 67-76.

Capítulo 2 Marco teórico y revisión bibliográfica

2.1 Definición del problema

La interacción entre una partícula y una interfase sólido-líquido es un fenómeno general que se produce durante la solidificación de materiales tales como: las aleaciones metálicas con partículas nativas, los materiales compuestos de matriz metálica con refuerzos cerámicos en forma particulada o fibrosa; y durante la cristalización de materiales semiconductores, ópticos, optoelectrónicos y biológicos. Cuando la interfase se aproxima a la partícula pueden ocurrir dos situaciones: que la interfase sea indiferente con respecto a la partícula o que la interfase empuje a la partícula delante de ella. Este último es el caso de un estado estacionario de repulsión. Estas interacciones afectan tanto la morfología de la interfase, como también la distribución de las partículas. En la Figura 2.1 se observa cómo cambia la forma de la interfase frente a la partícula: no se mantiene plana. También se observan partículas

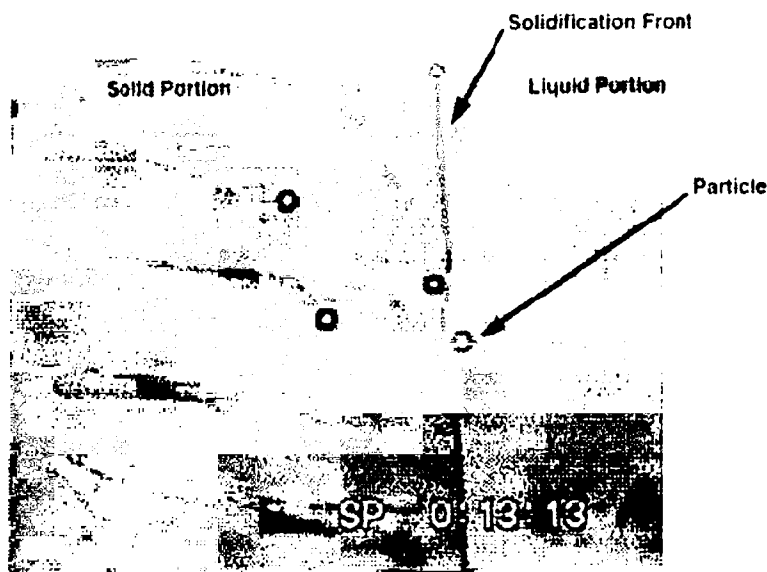


Figura 2.1. Fotografía de una experiencia de solidificación de un material conteniendo partículas sólidas [1].

atrapadas en el sólido. El fenómeno de “repulsión de la partícula por la interfase” se define como un estado estacionario en el cual la partícula y el frente de solidificación se mueven con la misma velocidad. En los sistemas donde se observa la repulsión se encontró que, si se incrementa la velocidad de solidificación, se alcanza una velocidad crítica V_c a partir de la cual la partícula es atrapada por el sólido [2-18]. Se han realizado diversos modelos [3, 4, 7] para determinar la velocidad crítica en función del radio de partícula para diferentes materiales. La velocidad crítica es el parámetro común utilizado en la literatura para cuantificar la transición de repulsión a atrapado de la partícula.

La repulsión de partículas depende de numerosos factores. Los modelos desarrollados consideran la situación más simple de partícula esférica e interfase plana y actualmente incluyen el flujo de fluidos. Entre los modelos se destaca el tratamiento y el origen de la fuerza de repulsión entre la interfase y la partícula.

Desde 1957 [2] numerosos estudios, tanto experimentales como teóricos, se han realizado sobre el fenómeno de repulsión y las fuerzas que actúan sobre la partícula al aproximarse la interfase de solidificación [3,4,19-25]. En la mayoría de los casos, el problema se simplifica al considerar una única partícula esférica delante de la interfase. En varios modelos [3,8,26-37] se introduce un refinamiento al considerar el efecto de interfases no planas, utilizando en algunos casos las soluciones numéricas.

2.2 Fuerzas que actúan sobre la partícula

El fenómeno de repulsión se puede describir en términos de un balance de fuerzas (ver ecuación 2.1) que están representadas en la Figura 2.2 donde:

$$\vec{F}_R + \vec{F}_a + \vec{F}_g + \vec{F}_o = m \frac{d\vec{V}_P}{dt} \quad \text{Ec. 2.1}$$

Proyectando sobre la normal $\vec{n}$ a la superficie:

$$F_R - F_a + \vec{F}_g \cdot \vec{n} + \vec{F}_o \cdot \vec{n} = m \frac{dV_p}{dt} \quad \text{Ec. 2.2}$$

F_R es la fuerza de repulsión que resulta de la interacción partícula-interfase, F_a es la fuerza de arrastre generada por el flujo de fluido alrededor de la partícula, F_g es la fuerza gravitacional, $F_o \propto \left\{ \rho, R, \frac{dV_p}{dt} \right\}$ [38-39] es la fuerza necesaria para acelerar el fluido adherido a la partícula, m es la masa de la partícula, y dV_p/dt es la aceleración de la partícula.

Asumiendo un estado estacionario la ecuación se simplifica a:

$$F_R - F_a + \vec{F}_g \cdot \vec{n} = 0 \quad \text{Ec. 2.3}$$

Considerando que la fuerza de gravedad es despreciable frente a las otras fuerzas, la ecuación para calcular la velocidad de equilibrio toma la forma:

$$F_R - F_a = 0 \quad \text{Ec. 2.4}$$

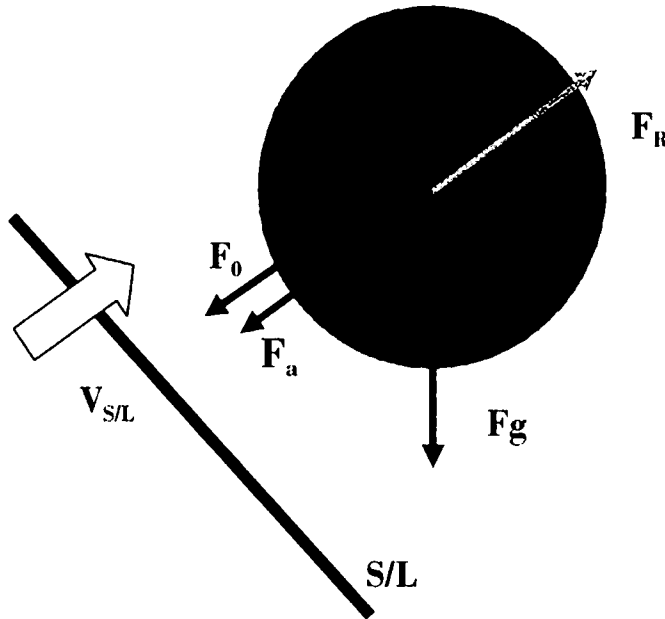


Figura 2.2 Esquema representativo de las fuerzas que actúan sobre la partícula y en las cercanías de la interfase sólido-líquida.

Si bien se puede simplificar el efecto de la gravedad debido a la gran diferencia en órdenes de magnitud con las otras fuerzas, experimentos bajo microgravedad han sido realizados con el objetivo de reducir las corrientes de convección y así estudiar el fenómeno de repulsión de una forma más simplificada [38].

Por lo tanto, las teorías que se aplican al fenómeno de repulsión deben incluir al menos dos fuerzas: la fuerza de arrastre y la fuerza de repulsión.

La fuerza de arrastre o viscosa F_a : resulta del movimiento de la partícula a través del fluido, la cual resiste el movimiento ocasionado por la fuerza de repulsión que tiende a alejarla de la interfase. Se puede calcular resolviendo la ecuación de Navier-Stokes para fluidos viscosos.

Fuerza de repulsión F_R : está relacionada a la energía interfacial (aproximación macroscópica) o a la interacción interatómica (aproximación microscópica que resulta de las fuerzas de van der Waals). La principal diferencia entre las teorías es la forma en que la fuerza de repulsión es considerada.

En términos de la energía interfacial toma la forma de la Ec. 2.5 [28, 29, 39]:

$$F_R = 2\pi R \Delta\gamma_0 \left(\frac{h_0}{h_0 + h} \right)^2 k^* \quad \text{Ec. 2.5}$$

Donde R es el radio de la partícula, h_0 es la mínima distancia entre la partícula y la interfase, h es la distancia partícula-interfase situada sobre el eje perpendicular a la interfase que cruza por el centro de la partícula, k^* el factor de forma de la interfase y $\Delta\gamma_0$ es el cambio de energía interfacial cuando la separación partícula interfase es mínima y que se define como:

$$\Delta\gamma_0 = \gamma_{PS} - (\gamma_{PL} + \gamma_{SL}) \quad \text{Ec. 2.6}$$

Donde γ_{PS} , γ_{PL} y γ_{SL} son las energías interfaciales entre la partícula y el sólido, entre la partícula y el líquido y entre el sólido y el líquido, respectivamente.

Cuando la interfase se encuentra a cierta distancia lejos de la partícula existen dos interfases: sólido-líquida y líquido-partícula. Cuando el sólido se aproxima a la partícula éstas dos interfases se convierten en una sola: sólido-partícula; el cambio termodinámico en esta nueva interfase está representado con $\Delta\gamma_0$ [2]

Si F_R es formulada en términos de las fuerzas de van der Waals , originada por la presión de separación (*disjoining pressure*) debido al cambio de potencial químico en el líquido confinado en el canal partícula-interfase, toma la forma [7, 19, 21, 22,23, 25] :

$$F_R = 2\pi B_3 \int_0^R \frac{r dr}{h^3(r)} \quad \text{Ec. 2.7}$$

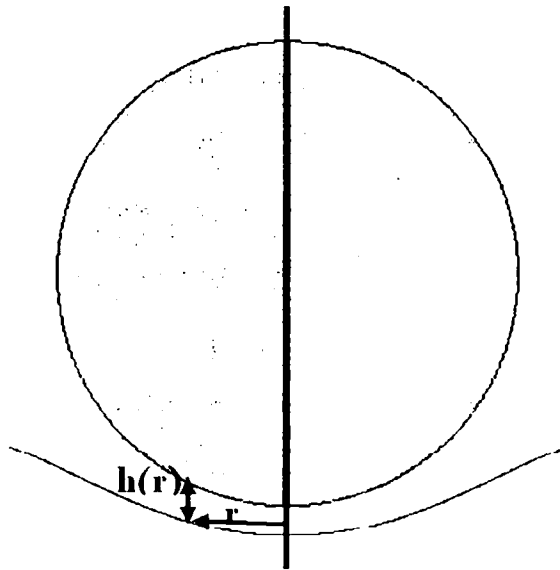


Figura2.3 Esquema del sistema partícula-interfase.

Donde r es la distancia desde el eje perpendicular a la interfase sólido-líquida hasta la interfase sólido-líquida como se muestra en la Figura 2.3, $h(r)$ es la separación entre la interfase y la partícula y B_3 es la constante efectiva de Hamaker entre la partícula y la interfase [7].

La constante de Hamaker se define como:

$$A \equiv -6\pi B_3 \quad \text{Ec. 2.8}$$

Los valores de A fueron medidos y calculados para diferentes combinaciones partícula-líquido-sólido [7].

La distancia mínima que debe existir entre la partícula y la interfase para que se produzca el atrapado de la partícula fue medida por Chernov *et al.* [7]. Ellos analizaron el movimiento de anillos de Newton al cambiar la longitud de onda de la luz en el canal partícula interfase y encontraron un espesor de $\leq 10^{-7}$ m. Sin embargo, la distancia que se considera en la mayoría de las teorías es de varios radios atómicos, pero no menor a 10^{-9} m. En caso contrario, el flujo entre partícula e interfase no es posible [7, 40-43].

2.3 Aproximaciones del modelo de repulsión

En los modelos desarrollados por Schvezov [44-45], se consideran interfases no-planas donde intervienen las fuerzas de Casimir-Lifshitz-van der Waals como la componente de repulsión y las fuerzas de arrastre como la componente de atracción. Se obtuvieron resultados que logran alcanzar un estado estacionario de **repulsión** e indican el caso límite donde se produce el **atrapado** de la partícula.

Numerosos trabajos se han publicado reportando la repulsión de partículas [2-18] proporcionando modelos para tratar de comprender el fenómeno. Los principales son descritos en detalle, a continuación:

Aproximaciones por tensión superficial: En la teoría de Uhlman *et al.* [3] el modelo supone que el mecanismo que controla el transporte de fluido en el canal partícula-interfase es la difusión de masa. La fuerza de repulsión se atribuye al cambio de energía interfacial. El cambio termodinámico neto en la

Omenyi y Neuman [6] introducen el argumento termodinámico, sugiriendo que si el cambio en la energía interfacial es negativo, la partícula es atrapada, y en caso contrario ocurre la repulsión de la partícula. La validez de esta teoría es sólo para bajas velocidades.

Shanguan *et al.* [28] plantearon un modelo que utiliza como fuerza de repulsión la energía interfacial, y como fuerza de atracción la de arrastre de Stokes. Utilizan la fórmula de Uhlman (Ec. 2.9) pero varían el valor del exponente n entre 2 y 7 dependiendo del tipo de fuerza repulsiva que se considere. Se consideran las diferencias en las conductividades térmicas entre la partícula y el fluido para corregir la forma de la interfase. Las incertidumbres en este modelo se encuentran en la elección del exponente n que describe el tipo de fuerza de repulsión, y en la precisión para calcular el cambio en la energía interfacial.

Stefanescu *et al.* [20] calculan la velocidad de equilibrio al igualar la fuerza de arrastre y la de repulsión. Si se considera que la velocidad de equilibrio es la velocidad crítica, se obtiene la siguiente ecuación:

$$V_c = \frac{\Delta\gamma_o h_o}{6\mu R} \left(2 - \frac{k_p}{k_L} \right) \quad \text{Ec. 2.11}$$

Donde μ es la viscosidad del líquido, k_p la conductividad térmica de la partícula y k_L la conductividad térmica del líquido. Además, el efecto de la curvatura de la interfase se lo incluye como una contribución a la energía libre total.

Aproximaciones por presión de separación: En la aproximación de Chernov *et al.* [7, 27] la fuerza de repulsión proviene de dos interacciones principales: dispersión o van der Waals y electrostática o de Debye. Ambas podrían conducir a fuerzas repulsivas o atractivas.

energía libre relacionado con la separación partícula-interfase se describe como:

$$\Delta\gamma = \Delta\gamma_0 \left(\frac{h_0}{h} \right)^n \quad \text{Ec. 2.9}$$

donde h_0 es la mínima distancia entre la partícula y la interfase, $\Delta\gamma_0$ es la energía libre cuando la separación es mínima entre la partícula y la interfase: $\Delta\gamma_0 = \gamma_{PS} - (\gamma_{PL} + \gamma_{SL})$, γ es la energía debida a la tensión superficial; y “P”, “L” y “S” se refieren a la partícula, al líquido y al sólido, respectivamente. El exponente n es un número positivo que adopta valores entre 4 y 5, aunque no está claro el criterio para la elección del mismo [3].

La expresión para la velocidad crítica V_c a partir de esta teoría resulta:

$$V_c = \left(\frac{n+1}{2} \right) \left(\frac{La_0\Omega D}{k_b T R^2} \right), \quad 4 \leq n \leq 5 \quad \text{Ec. 2.10}$$

Donde Ω es el volumen atómico, D es el coeficiente de difusión para la región entre la partícula y el sólido, k_b es la constante de Boltzman, T la temperatura, R el radio de la partícula, L es el calor latente por unidad de volumen y a_0 se define a partir de la relación modificada de Gibbs Thompson para el cambio de energía libre: $L(a_0/\rho_{int})$, siendo $1/\rho_{int}$ la curvatura de la interfase.

La concordancia con los resultados experimentales depende principalmente de la elección del coeficiente de difusión D . En la mayoría de los casos este modelo subestima el valor de la velocidad crítica V_c .

Bolling y Cissé [4] mejoran los resultados anteriores al tener en cuenta la forma de la interfase considerando para ello la temperatura de la interfase y la velocidad de solidificación. La fuerza de arrastre F_a es modificada por un factor $1/(1-\alpha)$ donde α es un coeficiente menor o igual a 1. Este factor es el que describe la curvatura de la interfase.

El modelo considera partículas esféricas, e incluye el efecto de la diferencia en las conductividades térmicas entre la partícula y el fluido que resultan en interfases no planas, además del efecto de Gibbs-Thompson.

La forma de la interfase se aproximó combinado un paraboloide y un plano, derivando en la siguiente ecuación:

$$F_R = \pi B_3 \frac{R}{h^2} \xi \quad \text{Ec. 2.12}$$

donde el valor de la constante B_3 adopta el valor universal de 10^{-21} J y ξ es el factor de corrección por la curvatura de la interfase.

Pötschke y Rogge[22] consideran las fuerzas de van der Waals entre dos esferas. La velocidad crítica se resuelve numéricamente incorporando efectos de soluto y térmicos.

En la mayoría de estos modelos la ecuación de equilibrio toma la forma $V_{eq} \propto 1/d_{eq}$ donde V_{eq} es la velocidad de equilibrio y d_{eq} es la distancia de equilibrio partícula-interfase. Se puede encontrar que, a cualquier velocidad de interfase, la partícula puede alcanzar una distancia a la cual se produce el estado de repulsión estacionaria.

Kim y Rohatgi [46] utilizan la presión de separación como fuerza repulsiva y acoplan el efecto de la disolución de soluto. Ellos muestran que la partícula delante de la interfase impide la difusión de soluto en el canal, resultando en la formación de una interfase convexa, y que esto disminuye la velocidad crítica de la interfase.

Aproximación térmica: la presencia de una partícula delante del frente de solidificación con diferentes valores de las conductividades térmicas para la partícula y el sólido afectan el campo térmico en las proximidades de la partícula, con un efecto en la forma de la interfase. Cuando la partícula sólida y el fluido tienen la misma conductividad térmica no se registra ningún efecto,

cuando la partícula tiene mayor conductividad que el sólido la interfase se vuelve cóncava, y cuando tiene menor conductividad que el fluido se vuelve convexa.

Ese efecto fue cualitativamente considerado por Bolling y Cissé [4] y por Zubko *et al.* [47] como criterio para el atrapado o repulsión de la partícula. En la Figura 2.3 se muestran los resultados de Bolling y Cissé presentados sólo en forma ilustrativa debido a que les resultaba difícil desarrollarlos en términos cuantitativos.

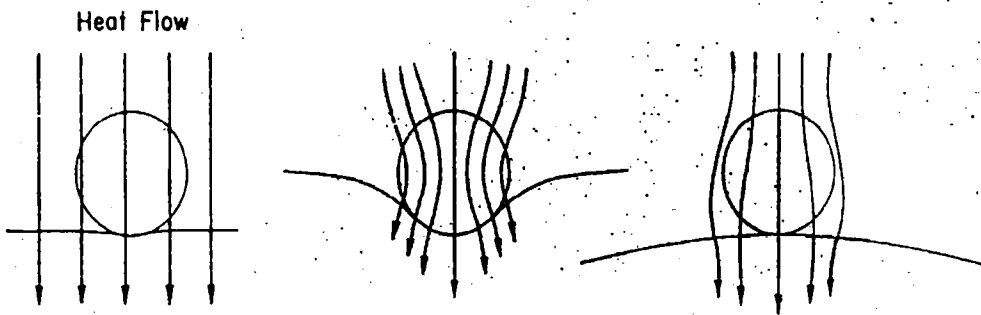


Figura 2.3 Cambios esperados en la forma de la interfase para la misma extracción de calor y diferentes conductividades térmicas [4].

Zubko muestra cualitativamente las predicciones de la transición de repulsión a atrapado considerando la relación de las conductividades térmicas. En su análisis, si la relación de las conductividades térmicas partícula-líquido, k_p/k_L , es mayor a uno, se espera el atrapado de la partícula, y si es menor a uno se espera que la partícula sea empujada (repelida) por el frente. Sin embargo, este criterio falla en algunos casos. Surapa y Rohatgi [48] propusieron una alternativa empírica llamada el criterio de la difusividad térmica. De acuerdo con esto, la relación de difusividades térmicas de la partícula a la del medio debe ser mayor que la unidad para capturar a la partícula.

$$[(k_p c_p \rho_p)/(k_L c_L \rho_L)]^{1/2} > 1 \quad \text{Ec. 2.13}$$

donde c_p y c_L son el calor específico de la partícula y del líquido, y ρ_p y ρ_L son la densidad de la partícula y del líquido, respectivamente.

Shangguan *et al.* [28] incluyen el efecto de la curvatura de la interfase en un tratamiento dinámico del proceso de repulsión. Obtienen la siguiente expresión que relaciona la curvatura en términos de las conductividades térmicas de la partícula y del líquido:

$$\frac{R_{int}}{R_{int} - R} = \frac{k_p}{k_L} \quad \text{Ec. 2.14}$$

donde R_{int} indica el radio de curvatura de la interfase.

A su vez para el cálculo de velocidades críticas obtiene la siguiente expresión:

$$V_c = \frac{h_0 \Delta \gamma_0}{12 \mu \alpha R} \quad \text{Ec. 2.15}$$

$$\text{siendo } \alpha = \frac{R_{int}}{R_{int} - R} \quad \text{Ec. 2.16}$$

Sin embargo, no encuentran evidencia experimental directa de la dependencia con k_p/k_L .

Se realizaron modelos para obtener la forma de la interfase, desarrollando técnicas numéricas en dos dimensiones. En la mayoría de los casos la partícula se considera estática mientras la interfase de solidificación avanza hacia ella. El primer trabajo presentado al respecto es de Sasikumar *et al.* [21], que realiza un modelo numérico considerando la curvatura de la interfase, es decir, incluyendo el efecto de la conductividad térmica. Ellos no pudieron dibujar la forma de la interfase debido a las complicaciones en el método numérico empleado.

Casses y Azouni [23] realizaron simulaciones numéricas considerando la presión de separación y los efectos de curvatura para determinar el cambio en

la forma de la interfase para las sustancias puras, con diferentes conductividades térmicas. Bajo similares suposiciones Rempel y Worster [25] consideraron otro tipo de fuerzas intermoleculares, las interacciones de van der Waals. Hadji [49-50] analizó la estabilidad de la interfase sólido-líquido y demostró que la forma de la interfase no era afectada solamente por la conductividad térmica sino también por la presión de separación. Kim y Rohatgi [46] estudiaron el efecto del campo de difusión en el canal, pero no presentan ningún cálculo de la interfase.

2.4 Simulaciones numéricas del modelo de repulsión

Los modelos matemáticos y las simulaciones numéricas permiten calcular el campo de flujo de fluidos alrededor de la partícula y el comportamiento de la partícula en función de la velocidad de solidificación. El problema se ha abordado desglosándolo en etapas más simples, las cuales van introduciendo las interacciones de forma paulatina hasta llegar a modelos más complejos.

Catalina *et. al* en el 2000 [39] desarrollaron un modelo capaz de describir la evolución de la forma de la interfase en las proximidades de la partícula basado en un modelo numérico en 2D para el seguimiento de esta interfase. El modelo considera la influencia del gradiente de temperatura y el efecto de Gibbs-Thompson, además de los efectos de la presión de separación. La temperatura de la interfase es controlada por la concentración de soluto y la curvatura. Se ignora el fluido alrededor de la partícula. Este modelo demostró la formación de una perturbación en la forma de la interfase en la zona del canal partícula-interfase por la acumulación de soluto. Para sistemas caracterizados por $k_P < k_L$ la presión de separación ocasiona un cambio en la curvatura de la interfase, y el incremento del gradiente de temperatura en el líquido disminuye el efecto de la presión de separación.

Garvin *et. al* [32-35] realizan simulaciones numéricas de la interacción del frente de solidificación con la interfase, consideran el movimiento de la partícula bajo la influencia de las fuerzas repulsivas de van der Waals y atractivas debido a la viscosidad. En sus últimos trabajos (publicados en 2007) incluyen el efecto de la curvatura de la interfase debido a las conductividades térmicas. Consideran el proceso de solidificación en 2 dimensiones. Para el estudio dividen el dominio en dos sub-regiones, una es la región “interna” correspondiente al canal partícula interfase de compleja resolución, y la otra región “externa” correspondiente al total del sistema partícula-interfase. Resuelven cada sistema por separado, y luego los acoplan. Consideran que la curvatura de la interfase determina en gran medida el comportamiento de la partícula. En su análisis concluyen que si la interfase resulta cóncava el atrapado es inevitable y si es convexa la partícula resulta empujada por el frente.

Kao *et al.* [37], en trabajos publicados en 2009, analizan la interacción partícula-interfase en una sistema binario. La forma de la interfase la determinan haciendo coincidir la temperatura de la interfase con el campo lineal de temperatura. La velocidad cuasi-estática de la partícula la encuentran realizando un balance que involucra el arrastre viscoso, van der Waals o las fuerzas electrostáticas de Debye y la flotación. Estudiaron la influencia de los solutos calculando numéricamente el campo de concentraciones y la forma de la interfase. Sus cálculos sugieren que el efecto de la cinética de sobreenfriamiento y la doble capa electrostática son insignificantes en los sistemas normales. Ellos muestran que la presencia de solutos reduce la velocidad crítica en un orden de magnitud, además de hacer mucho más fácil la captura de partículas. Aunque su modelo no fue validado con resultados experimentales.

2.5 Comparación con resultados experimentales

Interacción de partículas con una interfase plana:

Las medidas de las velocidades críticas reportadas en la literatura fueron comparadas con la predicción de las principales teorías. Los principales autores que obtuvieron las medidas experimentales de repulsión en agua se citan a continuación.

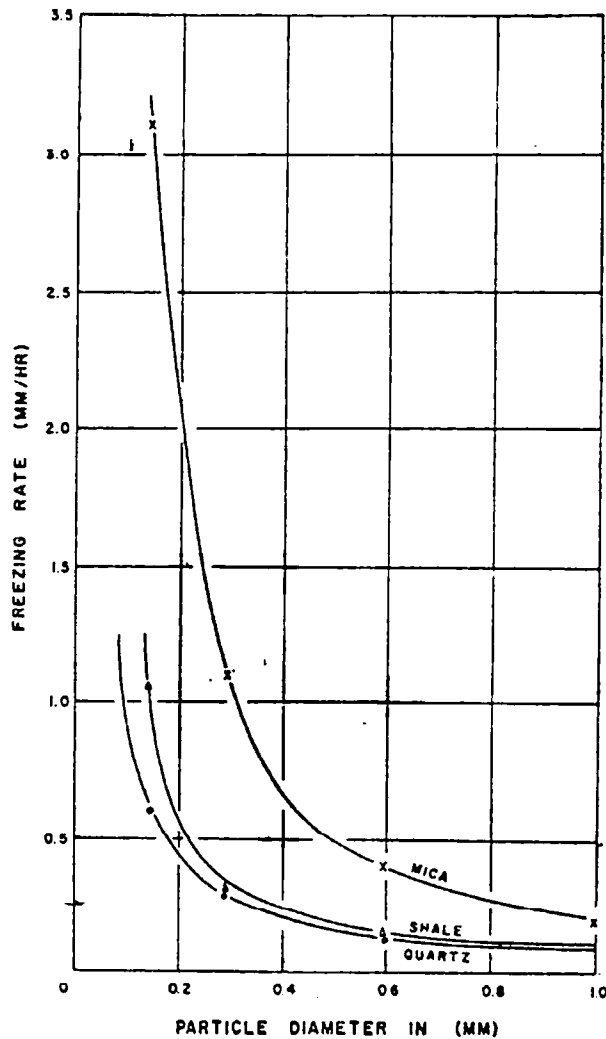


Figura 2.4 Velocidades críticas de solidificación en agua requeridas para partículas de mica, shale y cuarzo de diferentes diámetros (1962)[51].

Corte en 1962 [51] realiza estudios experimentales de la interacción entre partículas con interfases de hielo-agua para diferentes tamaños formas y velocidades de solidificación. En la Figura 2.4 se muestran los resultados

experimentales obtenidos de repulsión en agua para partículas de mica, “shale” y cuarzo. Demuestra que las partículas de mayor tamaño requieren de una velocidad de solidificación más lenta para que se pueda producir la repulsión de las mismas.

Hoekstra *et al.* en 1967 [52] realizan estudios experimentales de la repulsión de las partículas impulsadas por las interfases hielo-agua. Consideran el efecto del gradiente térmico en el líquido y de la fuerza de gravedad. En la Figura 2.5 se muestran los resultados experimentales de la repulsión de partículas de Pyrex en agua. Llegan a la misma conclusión que Corte; que la velocidad para atrapado de las partículas depende del tamaño de las mismas.

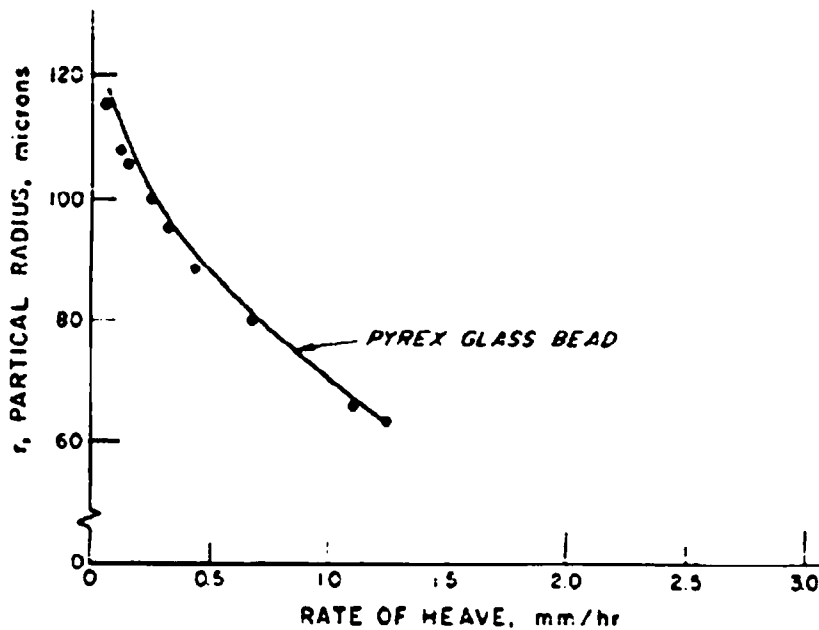


Figura 2.5 Velocidades críticas de solidificación de agua para partículas de pirex de diferentes diámetros (1967) [52].

Cissé y Bolling en 1971 [53], realizan estudios experimentales del atrapado de las partículas insolubles en el agua durante la solidificación del agua. En la Figura 2.6 se muestran los resultados experimentales que obtuvieron de tungsteno y cobre en agua. Demuestran la importancia de la

rugosidad de las partículas, su tamaño, la viscosidad del fluido y la fuerza de gravedad. Cuanto mayor sea el diámetro de las partículas, sin importar el tipo de partículas, menor es la velocidad crítica, y llegan a la conclusión de que la velocidad de captura crítica es menor cuando la viscosidad del líquido es mayor.

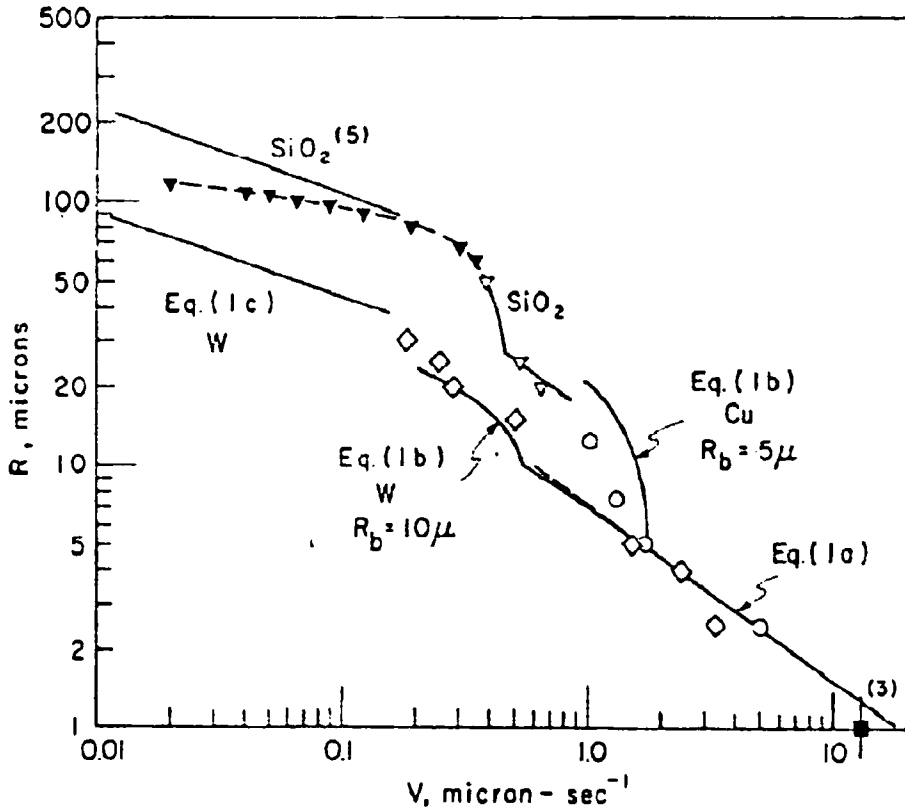


Figura 2.6 Velocidades críticas de solidificación de agua para partículas de Cu y W de diferentes diámetros [53] y un gradiente de temperatura de 10°C/cm . Las curvas provienen de cálculos teóricos para W y Cu.(1971)

Korber *et al.* en 1985 [54] determinan la velocidad crítica de partículas realizando estudios experimentales. Encuentran que la velocidad crítica es inversamente proporcional al radio de la partícula, como se sugiere en la teoría, suponiendo que la interfase es plana. En la Figura 2.7 se muestran los resultados experimentales que obtuvieron de látex en agua. Se puede ver que la velocidad crítica disminuye con el incremento del diámetro, con una dependencia que sugiere que la interfase sigue siendo plana. El efecto de la

concentración de soluto y los gradientes térmicos indican que los modelos teóricos para determinar las velocidades críticas deben considerar un criterio de estabilidad de la interfase, debido a que la repulsión de partículas parece ser afectado por la morfología de la interfase sólido-líquida.

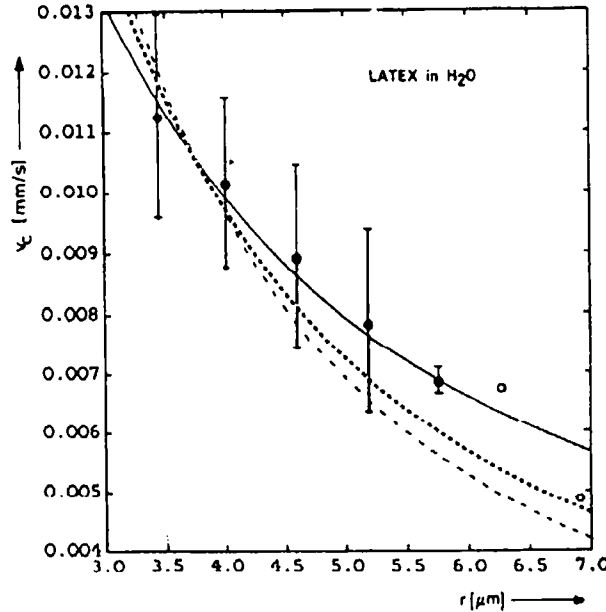


Figura 2.7 Velocidades críticas de solidificación de agua con partículas de látex de diferentes diámetros (1985) [54].

Al comparar los resultados experimentales con los teóricos empleando partículas de alúmina con tamaños que abarcan un intervalo de tres órdenes de magnitud, se puede observar que las teorías de Shangguan *et al.* [28] para alúmina y la teoría electrostática de Chernov *et al.* [7, 27] subestiman y sobreestiman los valores experimentales, respectivamente, tal como se muestra en la Figura 2.8 extraída del trabajo de Schvezov [45] y los cálculos que emplea se citan a continuación:

De la teoría de Shangguan *et al.*

$$\text{(para alúmina en agua)} \quad V_C = \frac{h_0 \Delta \gamma_0}{12 \mu \alpha R} = \frac{230}{R} \mu m^2 s^{-1} \quad \text{Ec. 2.17}$$

$$\text{(para cobre en agua)} \quad V_C = \frac{h_0 \Delta \gamma_0}{12 \mu \alpha R} = \frac{23}{R} \mu m^2 s^{-1}$$

De la teoría de Chernov para partículas pequeñas

$$V_C = 0.14 \mu^{-1} \gamma_{SL}^{1/3} B_3^{2/3} R_0^{-4/3} = 18.95 R^{-4/3} \mu m^{7/3} s^{-1} \quad \text{Ec. 2.18}$$

De la teoría electrostática de Chernov

$$V_C = 1.6 \times 10^{-7} \left(\frac{1}{R} - 17 \right) [V_c] = \text{cm.s}^{-1} \quad [R] = \text{cm} \quad \text{Ec. 2.19}$$

De la teoría de Bolling y Cissé

$$\mu^2 V_C^2 R^3 = 4 \Psi k T \gamma_{SL} h_0 / 9 \pi \quad V_C = 16.59 \times 10^{-10} R^{-3/2} \text{cm}^{5/2} s^{-1} \quad \text{Ec. 2.20}$$

$[V_c] = \text{cm.s}^{-1}$ $[R] = \text{cm}$, siendo Ψ una constante adimensional que es función de la curvatura de la interfase [4]

De la teoría de Chernov para partículas tamaño $> 200 \mu\text{m}$

$$V_C = 0.15 \mu^{-1} B_3^{3/4} R^{-1} \left(\frac{G \Delta S}{\Omega} \right)^{1/4} \quad V_C = 2.192 \times 10^{-7} R^{-1} \text{cm}^2 s^{-1} \quad \text{Ec. 2.21}$$

$[V_c] = \text{cm.s}^{-1}$ $[R] = \text{cm}$, donde G es el gradiente de temperatura y ΔS la entropía de fusión.

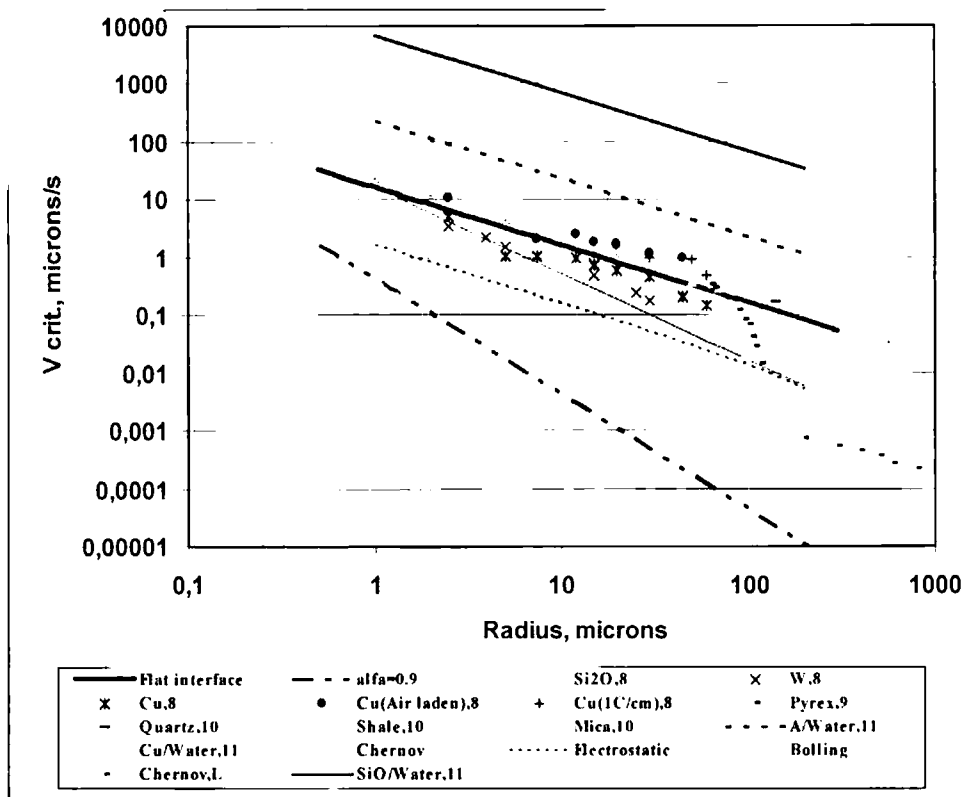


Figura 2.8 Velocidades críticas para repulsión en agua; teóricas y experimentales [45].

Se puede ver en la Figura 2.8 que el efecto térmico sobre la repulsión, tal como está incluido en la teoría de Shangguan *et al.* [28], es muy fuerte. Para grandes partículas la predicción dada por la teoría de Chernov *et al.* [7,27] arroja valores tres órdenes de magnitud menores que los resultados experimentales. *De acuerdo a Schvezov [45] la dispersión de los resultados experimentales no es tan grande como la dispersión entre las diferentes teorías.*

A partir de esta revisión se observa que las teorías no logran ajustarse con exactitud a los resultados experimentales. Entonces, el lograr explicar la dispersión de los resultados experimentales utilizando las simulaciones sería un gran aporte en el estudio del fenómeno de repulsión.

Referencias

1. <http://www.tecmasters.com/space-technology/datasheets/PEP.pdf>
2. M. V. Pikunov, The behavior of suspended impurities during crystallization. Non ferrous metals, their treatment and working (Moscow: Metallurgizdat, 1957), 56-67.
3. D. R. Uhlmann, B. Chalmers and K. A. Jackson, "Interaction between particles and a solid-liquid interface", J. Applied Physics, 35 (1964), 2986-2993
4. G. F. Bolling and J. Cisse, "A theory for the interaction of particles with a solidifying front", J. Crystal Growth, 10 (1971), 56-66.
5. A.W. Neumann, D.J. van Oss, J. Szekely, "Thermodynamics of Particle Engulfment", Kolloid Z.U.Z. polymere, 251 (1973), 415-423.
6. S.N. Omenyi, A.W. Neumann, "Thermodynamic Aspects of Particle Engulfment by Solidifying Melts", J. Appl. Phys, 47 (1976), 3956-3962..
7. A. A. Chernov, D. E. Temkin, S. M. Mel'nikova. "Theory of the capture of solid inclusions during the growth of crystals from the melt", Sov. Phys. Crystallogr., 21(4) (1976), 369-379..
8. J. Cisse and G. F., Bolling. "A theory for the interaction of particles with a solidifying front", J. of Crystal Growth, 10 (1971), 67-76.
9. C. E. Schvezov, "Interaction of particles with an advancing solid/liquid interface" Master of Applied Science Thesis. Department of Metals and Materials Engineering. UBC. Canadá.1983
10. C. E. Schvezov and F. Weinberg. Interaction of Particles with an Advancing Solid-Liquid Interface. 33rd. Canadian Metal Physics Conference. Kingston. Ontario. Canadá. Junio, 1983.
11. C. E. Schvezov and F. Weinberg. Interaction of Iron Particles with a Solid-Liquid Interface in Lead and Lead-Alloys. Met. Trans. 16B, (1985) pp 367-375. USA.
12. Y. Fasoyinu and C. E. Schvezov. F. Weinberg, "Interaction of ceramic particles with an advancing solid-liquid interface in aluminum based composites", Int. Sol. Proc. Pergamon, 1990, 243-252. .
13. A. Mitchel, A. Schmalz, C. E. Schvezov and S. Cockroft. International Symposium on Superalloys 718,625,706 and Derivatives. June 27-29,1994. Pittsburgh, Pennsylvania, USA.
14. O. Han and J. D. Hunt, Redistribution of Particles during Solidification, ISIJ International. Vol. 35 (1995), No. 6, pp. 693-699
15. Y. Hongbin, S. Hiroyuki, E. Toshihiko and S. Mikio, In-Situ Formation Observation of Collision. of Alumina Inclusion Agglomeration and Cluster Particles on Steel Melts, ISIJ International, Vol. 37 (1 997), No. 10, pp. 936-945
16. H. Shibata et al., "In-situ Observation of engulfment and pushing of nonmetallic inclusions in steel melt by advancing melt/solid interface", ISIJ International, 38 (1998), 149-156.
17. S. Mikio, Y. Ryuji, M. Katsuhiko and N. Masayuki, Inclusion Particle Growth during Solidification of Stainless Steel, ISIJ International, Vol. 41 (2001), No. 3, pp. 247-256
18. P. Diko , K. Zmorayová , N. Hari Babu , D.A. Cardwell, Shape change during solidification of bulk, single grain Y-Ba-Cu-O samples fabricated by top seeded melt growth. Physica C 398 (2003) 1-7
19. A. A. Chernov and D. E. Temkin 1976 Crystal Growth and Materials. Ed. by E. Kaldis and H. J. Sheel. (North Holland, Amsterdam, 1977) pp 3-77.

21. R. Sasikumar, T.R. Ramamohan, B.C. Pai. Critical velocities for particle pushing by moving solidification fronts. *Acta Metall* 1989;37(7): 2085–91
22. J. Pötschke, V. Rogge . On the behaviour of foreign particles at an advancing solid–liquid interface. *J Cryst Growth* 1989;94(3):726–38.
23. P. Casses, M.A. Azouni,. A General theoretical approach to the behavior of foreign particles at advancing solid–liquid interfaces. *Adv Colloid Interface Sci* 1994;50:103–20.
24. M. Ode, J.S. Lee, T. Suzuki, S.G. Kim, W.T. Kim. Numerical simulation of interface shape around and insoluble particle for Fe–C alloys using phase field model. *ISIJ Int* 1999;39(2):149–53.
25. A.W. Rempel , M.G. Worster . The interaction between a particle and an advancing solidification front. *J Cryst Growth* 1999;205(3):427–40.
26. J.W. Garvin, H.S. Udaykumar. Particle-solidification front dynamics using a fully coupled approach. Part I. Methodology. *J Cryst Growth* 2003;252(1):451–66.
27. A.A. Chernov, D.E. Temkin, A.M. Mel’nikova. The influence of the thermal conductivity of a macroparticle on its capture by a crystal growing from a melt. *Sov Phys Crystallogr* 1977;22(6):656–8.
28. D. Shangguan, S. Ahuja, D.M. Stefanescu. An analytical model for the interaction between an insoluble particle and an advancing solid/liquid interface. *Metall Trans* 1992;23A(2):669–80.
29. S. Sen, B.K. Dhindaw, D. M. Stefanescu, A. Catalina, P.A. Curreri. Melt convection effects on the critical velocity of particle engulfment. *J Cryst Growth* 1997;173(3):574–84.
30. J.W. Garvin, H.S. Udaykumar, Particle-solidification front dynamics using a fully coupled approach, part II: comparison of drag expressions, *Journal of Crystal Growth* 252 (2003) 467–479
31. M. Kolbe , X.R. Liu , T. Volkman , R. Röstel , P.K. Galenko , G. Eggeler , B. Wei , D.M. Herlach, Interaction of solid ceramic particles with a dendritic solidification front. *Materials Science and Engineering A* 375–377 (2004) 524–527
32. J.W. Garvin, H.S. Udaykumar, Drag on a particle being pushed by a solidification front and its dependence on thermal conductivities, *Journal of Crystal Growth* 267 (2004) 724–737
33. J.W. Garvin, H.S. Udaykumar, Drag on a ceramic particle being pushed by a metallic solidification front. *Journal of Crystal Growth* 276 (2005) 275–280.
34. J.W. Garvin, Y. Yang, H.S. Udaykumar Multiscale modeling of particle–solidification front dynamics, Part I: Methodology ”, *International J. of Heat and Mass Transfer* 50 (2007) 2952–2968
35. JW Garvin, Y Yang, HS Udaykumar “Multiscale modeling of particle-solidification front dynamics. Part II: Pushing-engulfment transition”, *International J. of Heat and Mass Transfer*, 50(2007),2969–2980
36. M.S. Park, A.A. Golovin, S.H. Davis “The encapsulation of particles and bubbles by an advancing solidification front” *J. Fluid Mech.* (2006) Vol 560 pp. 415-436
37. J.C.T. Kao, A.A. Golovin, S.H. Davis, “Particle capture in binary solidification”, *J. Fluid Mech.* (2009) 625, pp 299-320
38. D.M. Stefanescu, F.R. Juretzko, B.K. Dhindaw, A. Catalina, S. Sen, and P.A. Curreri, “Particle Engulfment and Pushing by Solidifying Interfaces: Part II. Microgravity Experiments and Theoretical Analysis” *Metall. and Mater. Trans.* 29A, June 1998—1697

39. A.V. Catalina, S. Mukherjee, and D.M. Stefanescu, "A Dynamic Model for the Interaction between a Solid Particle and an Advancing Solid/Liquid Interface" *Metall. and Mater. Trans.* 31A (2000) 2559
40. M.A. Azouni, P. Casses P. Thermophysical properties effects on segregation during solidification. *Adv Colloid Interface Sci* 1998; 75(2):83–106.
41. K.V Sharp; R.J Adrian, Transition from laminar to turbulent flow in liquid filled microtubes, *Exp. Fluids* 38:1.
42. K Travis.; B Tood.; D. Evans, Departure from Navier–Stokes hydrodynamics in confined liquids, *Phys. Rev. E* 55,(1997), 4288.
43. R. L. Daugherty, A.C. Ingersoll. "Mecánica de los fluidos"; (1964), p.348.
44. C.E. Schvezov, Modelización dinámica de la interacción de partículas con interfases sólido líquido durante la solidificación. *Anales de la SAM'98-IBEROMET V. Tomo I*. Pp. 57-60. 14-18 Septiembre 1998. Rosario. Argentina.
45. C.E. Schvezov, Dynamic Calculations for Particle Pushing. *Solidification 1999*. Edited by W. H. Hofmeister, J. R. Rogers, N. B. Singh, S. P. Marsh and P. W. Vorhes, pags. 251-261 . TMS (USA). 1999.
46. J. K. Kim and P. K. Rohatgi, The effect of the diffusion of solute between the particle and the interface on the particle pushing phenomena, *Acta mater.* Vol. 46, No. 4, pp. 1115-1123, 1998
47. A.M. Zubko, V.G. Lobanov, V.V. Nikonova. Reaction of foreign particles with a crystallization front. *Sov Phys Crystallogr* 1973; 18(2):239–41.
48. M.K. Surappa, P.K. Rohatgi. Heat Diffusivity criterion for the entrapment of particles by a moving solid–liquid interface. *J Mater Sci* 1981;16(2):562–4.
49. L. Hadji, A.M.J. Davis, "The influence of insoluble spherical particles on the stability of a planar solidifying interface", *Journal of Crystal Growth* Vol 191. Issue 4, 1 August 1998, Pages 889-896
50. L. Hadji, Modelling and Asymptotic Analysis of Particle-Interface Interaction *Mathematical and Computer Modelling* 36 (2002) 147-156
51. A.E. Corte "Vertical Migration of Particles in Front of a Moving Freezing Plane"; *J. of Geophysical Res.*, Vol 67(3) (1962),1085-1090.
52. P. Hoekstra and D. R. Miller, "On the Mobility of Water Molecules in the transition Layer between Ice and a Solid Interface; *J. of Colloid. Interface Sci.*, 25, (1967), p. 166.
53. J. Cisse and G. F. Bolling, "The steady state rejection of insoluble particles by salol grown from the melt" *Journal of Crystal Growth* 11 (1971) 25-28
54. Ch. Körber - G. Rau y M.D. Cosman-E.G. Cravalho, "Interaction of Particles and a Moving Ice-liquid Interface"; *J. of Crystal Growth*, 72, (1985), p. 649.

Capítulo 3 Objetivos

El objetivo de este trabajo es avanzar sobre el modelo desarrollado por Schvezov [1, 2], definiendo un límite preciso que permita determinar la transición entre repulsión estacionaria y atrapado de la partícula, el cual se puede establecer por una separación mínima entre partícula e interfase para la cual la película que los separa pueda considerarse como un fluido. Además, se deben tener en cuenta las propiedades térmicas del sistema partícula, sólido y matriz, las cuales definen la morfología de la interfase.

Se pretende obtener un modelo que permita predecir los casos en que se produce la repulsión de partículas debido a una interfase sólido-líquido que se mueve, realizando simulaciones por computadora.

Los resultados del trabajo contribuirán directamente en todos los casos enunciados al comienzo ya que el avance en el conocimiento de este fenómeno permitirá diseñar y producir materiales con mejores propiedades, ya sea en los casos en que las partículas son beneficiosas, por ejemplo en materiales compuestos, como perjudiciales, por ejemplo en materiales ópticos.

Objetivos específicos

Se estudiará mediante modelización por elementos finitos el proceso de repulsión de una partícula frente a una interfase de solidificación.

Los campos térmicos y de fluidos son desacoplados. En el modelo se *calcularán las fuerzas de arrastre* viscosas involucradas en la dinámica de fluidos como la componente atractiva *utilizando dinámica de fluidos computacional* y se incorporará fuerzas de Casimir-Lifshitz-van der Waals entre la interfase y la partícula como componente de repulsión.

Se validará el modelo computacional mediante la comparación con resultados obtenidos de la literatura para modelos físicos.

Referencias

1. Schvezov, C. Modelización dinámica de la interacción de partículas con interfaces sólido líquido durante la solidificación. Anales de la SAM'98-IBEROMET V. Tomo I. Pp. 57-60. 14-18 Septiembre 1998. Rosario. Argentina.
2. Schvezov, C. E. . Dynamic Calculations for Particle Pushing. Solidification 1999. Edited by W. H. Hofmeister, J. R. Rogers, N. B. Singh, S. P. Marsh and P. W. Vorhes, pags. 251-261 . TMS (USA). 1999.

Capítulo 4 Formulación del modelo

La modelización matemática del proceso de repulsión estacionaria por su complejidad requiere que se realicen simplificaciones que permitan aislar efectos básicos principales del fenómeno. Además, una vez establecidas las simplificaciones analíticas, la complejidad del cálculo numérico exige simplificaciones adicionales con el objeto de realizar los cálculos en tiempos apropiados a las herramientas computacionales disponibles.

El modelo numérico adoptado se simplifica desacoplando el cálculo de los campos térmicos y de fluidos tal como se muestra en la Figura 4.1.

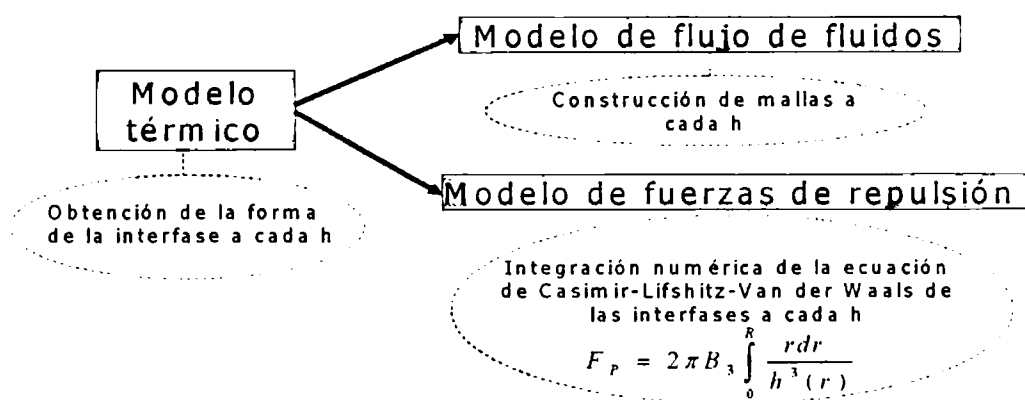


Figura 4.1 Esquema del desacople de los campos térmicos y de fluidos.

Mediante la simulación del campo térmico, primero se calculará el proceso de enfriamiento del sistema líquido-partícula y como resultado se obtendrá la forma de la interfase para diferentes separaciones partícula-interfase. Cada interfase obtenida configurada con la partícula se utiliza para simular el flujo de fluidos alrededor de la partícula. Con el campo de fluidos obtenido se calculan las fuerzas de arrastre y con la configuración geométrica interfase-partícula las fuerzas de repulsión mediante integración numérica.

Estos resultados, calculados por separado, luego serán combinados para obtener los valores de la velocidad de equilibrio y de la distancia h de equilibrio para el estado estacionario de repulsión.

Se optó por el método de elementos finitos para resolver el problema de campo térmico y de flujo de fluidos porque este método ofrece versatilidad para estudiar sistemas con geometrías irregulares, y con condiciones de frontera no usuales, que proporciona una mejor aproximación [1].

4.1 Modelo térmico

Como ya fue mencionado en el Capítulo 2 la forma de la interfase está condicionada por las propiedades térmicas de los elementos que componen el sistema. Los parámetros más significativos son las conductividades térmicas y los calores específicos de la partícula y de la matriz.

El campo térmico generado por el proceso de enfriamiento, que simula la solidificación y que produce el movimiento de una interfase de solidificación hacia una partícula, es modelado dinámicamente. En la Figura 4.2 se esquematiza una de las formas que puede tener la interfase en función de la separación partícula-interfase h , cuando la partícula es conductora con respecto a la matriz líquida.

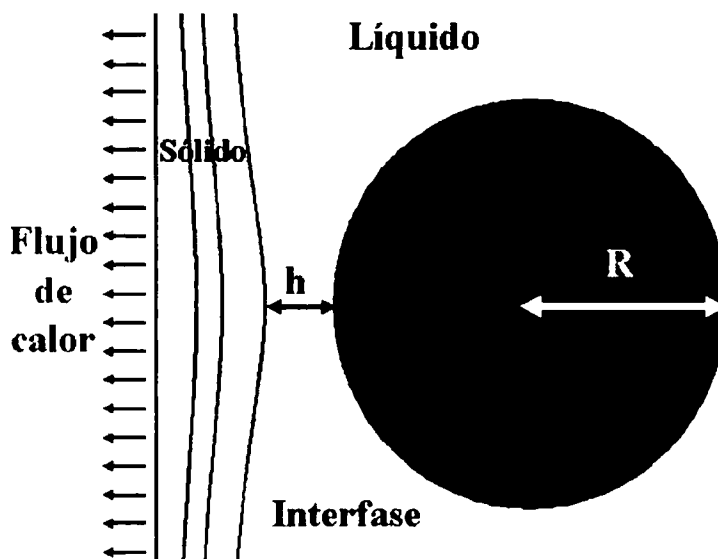


Figura 4.2. Esquema del modelo térmico donde se aprecia la forma que puede adoptar la interfase a diferentes distancias partícula-interfase.

Se estudiarán las geometrías de la interfase de solidificación en relación con:

- * *Simulaciones en modelo bidimensional y en modelo axi-simétrico.*
- * *Tamaño de partícula y forma de partícula.*
- * *Velocidad de extracción de calor.*
- * *Conductividades térmicas.*

Las dos simplificaciones por simetría más utilizadas que se pueden aplicar a este problema son los modelos bidimensionales y axi-simétricos. El primero es ampliamente usado en la literatura y debido a esto lo que se pretende es evaluar cuál de los dos reproduce mejor el problema físico y hasta qué grado de simplificación pueden alcanzarse resultados aceptables.

El objetivo al estudiar el grado de influencia del tamaño de partícula es reducir el número de simulaciones mediante escalado. Respecto a la forma de la partícula se pretende determinar cuáles pueden ser las desviaciones con respecto a una partícula no esférica. (Caso ideal).

Se investiga la influencia de la velocidad de extracción de calor debido a que afecta la forma y la velocidad de avance de la interfase.

De los parámetros mencionados anteriormente, uno de los más estudiados es la conductividad térmica [2-11], que es uno de los más significativos en cuanto a la forma de la interfase. (Ver Capítulo 2). En el caso donde las conductividades de todas las fases presentes son iguales, la interfase resultante es plana. El caso donde la conductividad de la partícula es mayor que la de la matriz produce una interfase cóncava y, cuando la partícula es aislante, la interfase es convexa.

Para simular la solidificación se resolvieron las ecuaciones de conservación de la masa, el momento y la energía en forma dinámica:

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + (\rho u_j)_{,j} = 0 \quad \rightarrow \text{Conservación de la masa (4.1)}$$

$$\rho \left(\frac{\partial u_i}{\partial t} + u_j u_{i,j} \right) = \sigma_{ij,j} + \rho f_i \quad \rightarrow \text{Conservación del momento (4.2)}$$

$$\text{donde} \quad \sigma_{ij} = -p\delta_{ij} + \tau_{ij}$$

$$\text{y} \quad \tau_{ij} = 2\mu\epsilon_{ij}$$

$$\rho \left(\frac{\partial T}{\partial t} + u_i T_{,i} \right) = (kT_{,i})_{,i} + Q \quad \rightarrow \text{Conservación de la energía (4.3)}$$

donde $j = 1,2$ para flujos en dos dimensiones o axi-simétrico, $i = 1,2$ para flujos en dos dimensiones o axi-simétrico, $i, j = 1,2,3$ para flujos en tres dimensiones, la combinación de una coma y el subíndice (i o j) es la notación abreviada de la derivada espacial, por ejemplo $(,i)$ representa la primer derivada con respecto al índice, ρ es la densidad, t es tiempo, u es la velocidad, σ_{ij} es el tensor de tensiones, f_i es la fuerza por unidad de masa, p es la presión, τ_{ij} es el tensor de tensión desviadora, δ_{ij} es el delta de Kronecker, μ es la viscosidad dinámica, ε_{ij} es el tensor de velocidad de deformación, T es la temperatura, k es la conductividad térmica y Q es la generación de calor.

Se considera una partícula de la misma densidad que la matriz líquida, condición que junto con la imposición de contornos inmóviles de la matriz y la partícula no produce circulación dentro del fluido. Se simula al sólido a través de un fluido de viscosidad elevada, igual a 10^6 veces la viscosidad del líquido. Las restantes propiedades (k y C_p) se consideran independientes de la temperatura, adoptándose las correspondientes al Aluminio puro para la matriz.

Para realizar el estudio de la deformación de la interfase, tanto al considerar partícula esférica como cilindro infinito, se emplean las relaciones entre las conductividades térmicas k_P/k_L igual a 1; 0,1 y 10. Donde k_P y k_L son las conductividades térmicas de la partícula y la matriz, respectivamente.

Las propiedades se consideran independientes de la temperatura.

4.1.1 Modelo térmico, cilindro infinito

El dominio está constituido por un cilindro infinito de radio R inmerso en una matriz que se está solidificando. Se considera extracción calórica

unidireccional, la cual produce la solidificación de la matriz. Las demás fronteras se encuentran aisladas.

La malla utilizada se muestra en la Figura 4.3. Se obtienen resultados cualitativos con bajo esfuerzo computacional, y permite comparar con los resultados presentados por otros autores [2-11]. En este caso no se considera el calor latente. Esta suposición se realiza de acuerdo a Chernov *et al.* [12] en la que al considerar una velocidad de crecimiento lenta, el calor latente liberado por unidad de tiempo y por unidad de área se considera despreciable comparado con el flujo de calor.

Se emplea una malla no estructurada estática de 1000 elementos para la matriz y de 300 elementos para el cilindro. Refinando la malla en las inmediaciones del cilindro. La forma y posición de la interfase se determina siguiendo la isoterma de solidificación del aluminio puro: 933 K.

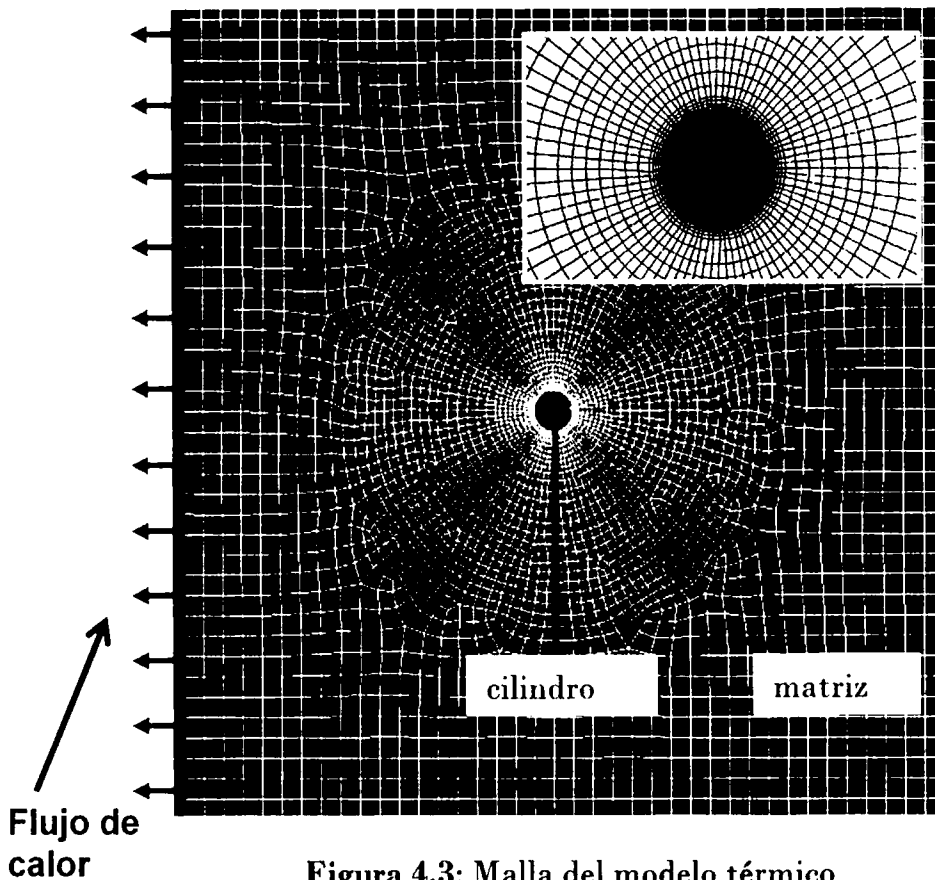


Figura 4.3: Malla del modelo térmico

En la resolución se emplea el método de elementos finitos a través de una formulación de residuos ponderados de Galerkin [1]. Se utilizan elementos cuadriláteros con funciones de interpolación de segundo orden para la temperatura y la velocidad y de primer orden para la presión.

Para la resolución numérica del sistema de ecuaciones se emplea el método de Newton-Raphson, con una tolerancia del 0.01%. El cálculo dinámico se resuelve mediante el método de Crank-Nicholson con un paso de tiempo variable, ajustado mediante Adams-Bashforth [1].

4.1.2 Modelo térmico axi-simétrico

Debido a la geometría del sistema, la simulación mediante elementos finitos, se realiza mediante un modelo de simetría axial. El dominio está constituido por una partícula esférica inmersa en un líquido que se está

solidificando. Se considera la transferencia de calor por conducción y la solidificación por extracción calórica unidireccional, en el sentido de avance de la interfase.

Se utilizó una malla estática de 50000 elementos con funciones de interpolación de primer orden en la temperatura. Se refinó la malla en las cercanías de la partícula para obtener un mejor detalle de la curvatura de la interfase en los resultados, como se puede ver en la Figura 4.4.

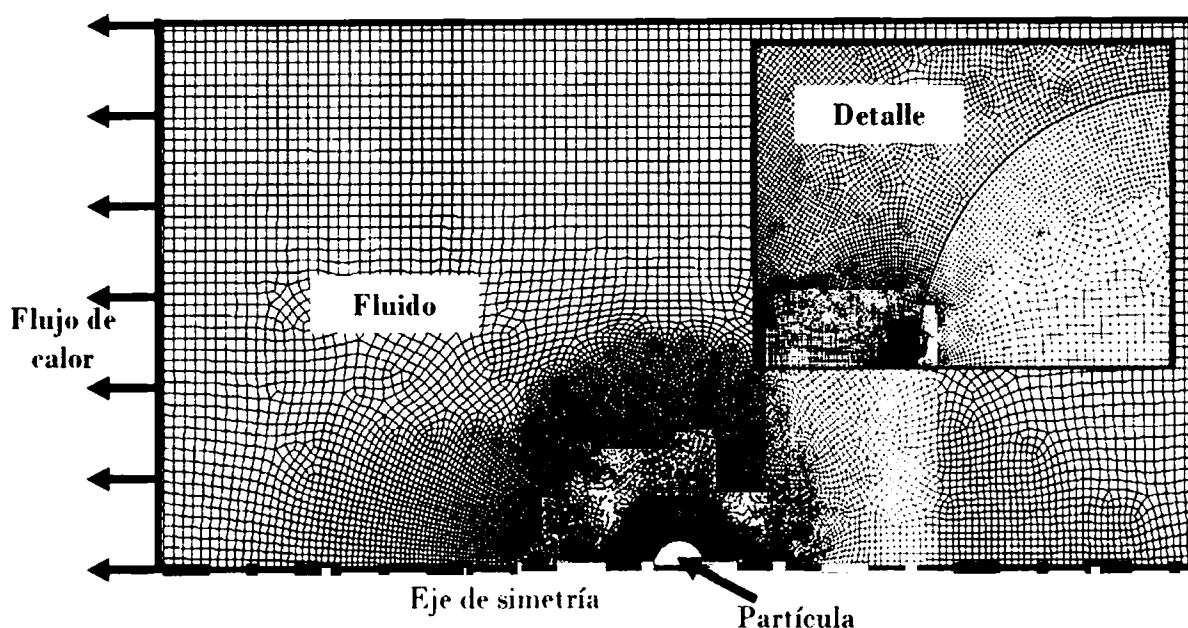


Figura 4.4. Malla empleada en el modelo térmico axi-simétrico.

En la resolución se emplea el método de elementos finitos a través de una formulación de residuos ponderados de Galerkin [1]. Se emplean elementos cuadriláteros con funciones de interpolación de segundo orden para la temperatura y la velocidad, y de primer orden para la presión.

Se utilizan reducciones de los valores de los pasos del tiempo para obtener una buena delineación de la forma y de la posición de la interfase, especialmente, en las situaciones donde ésta se posiciona a distancias de la partícula menores a 10^{-7}m , reduciéndose el paso del tiempo hasta valores de $5 \cdot 10^{-6}$ segundos. Se utiliza el método implícito de Cranck-Nicolson para la solución del problema en estado transitorio, Ec. 4.3.

4.2 Modelo de flujo de fluidos

Las fuerzas de arrastre son calculadas numéricamente a partir del campo de velocidades del fluido alrededor de la partícula. El campo se obtiene resolviendo las ecuaciones de Navier Stokes utilizando el método de elementos finitos.

Se estudia la influencia de la forma de la interfase en la fuerzas de arrastre para tres configuraciones de interfase: plana, cóncava y convexa. En cada configuración se construyen mallas con elementos de diferentes tamaños, refinando las mallas alrededor de la partícula para obtener mejores resultados.

Se comparan los resultados obtenidos con un modelo tridimensional y con un tridimensional axi-simétrico. En el modelo tridimensional se emplean elementos tetraédricos y en el modelo axi-simétrico elementos toroidales de sección cuadrilátera, adoptando disposiciones no estructuradas para construir la malla.

Se adopta una partícula esférica arrastrada por una interfase móvil, representando una situación de repulsión estacionaria. En este caso se impone la condición de estado estacionario de repulsión, es decir, la partícula se mueve junto con la interfase manteniendo una separación constante. Por lo tanto se consideran solamente las ecuaciones de balance de masa y de momento. Se supone flujo laminar y se analiza la influencia de la separación entre la partícula y la interfase, la velocidad de movimiento de la interfase y el tamaño de la partícula.

Las distancias partícula-interfase (h) deben ser mayores que h_{min} , siendo $h_{min} = 10^{-8}$ m. Este valor es la mínima distancia que se puede considerar para que el fluido mantenga las propiedades que lo definen [12-16]. El rango que se utiliza en los cálculos es entre h_{min} y $2R$

Las velocidades que se utilizan son menores que la velocidad crítica (V_c), siendo V_c la velocidad en la que la repulsión crítica no se produce. Por encima de este valor de velocidad no se observa repulsión. El rango de velocidades utilizado es entre 1×10^{-10} m/s y 1×10^{-4} m/s.

4.2.1 Modelo de flujo de fluidos tridimensional

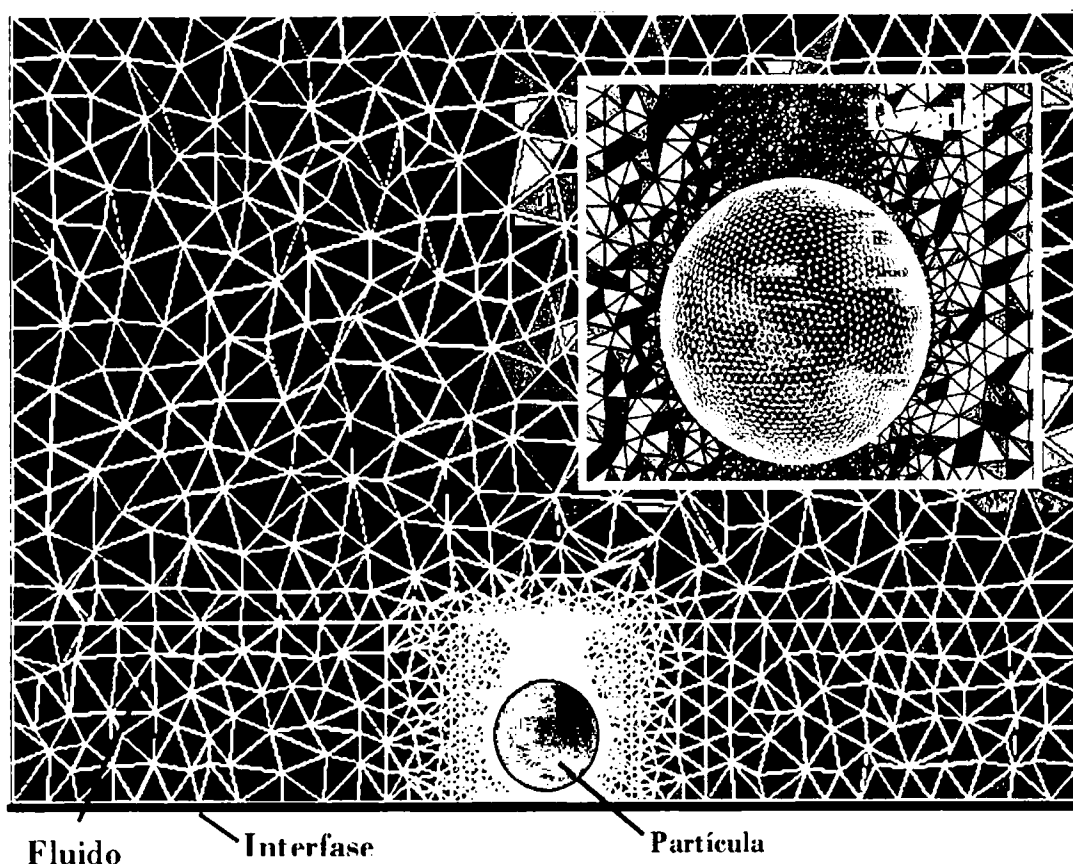


Figura 4.5: Malla sobre la superficie externa que se utiliza para el modelo en tres dimensiones con interfase plana. Detalle: ampliación sobre la superficie de la partícula.

En el diseño del modelo se utiliza un sólo diámetro de partícula, $50\mu\text{m}$, posicionada a seis distancias diferentes desde la interfase. Para cada posición se construye una malla diferente. En la interfase se impone una velocidad de fluido constante, perpendicular a la misma y libre en los demás contornos. Sobre la superficie de la esfera se impone la condición de no deslizamiento. El

fluido se considera Newtoniano ya que el número de Reynolds (Re) con respecto al diámetro de la partícula es del orden de 10^{-6} y aún menor

En la malla del modelo tridimensional se emplean elementos tetraédricos con funciones de interpolación lineales para la velocidad y para la presión, utilizando el método de Petrov-Galerkin el cual es lo suficientemente estable tratar elementos con funciones de interpolación lineales en ambas magnitudes. En total se emplean aprox. 200000 elementos, refinando en la zona cercana a la partícula, como se muestra en la Figura 4.5.

La resolución del sistema se realiza mediante un método desacoplado, donde las variables se resuelven individual y secuencialmente, mediante eliminación gaussiana, alcanzando la solución en forma iterativa.

4.2.2 Modelo axi-simétrico

El objetivo está centrado en calcular las fuerzas de arrastre sobre la partícula debido a la circulación del fluido hacia la interfase. En vista de la geometría del sistema se emplea un modelo de simetría axial, lo que reduce el número de elementos en la construcción de la malla y por lo tanto reduce los tiempos de cálculo y recursos de almacenamiento de la computadora.

En la discretización del dominio se emplea una malla no estructurada estática de elementos toroidales de sección cuadrilátera, una por cada posición de la interfase, utilizando 30000 a 50000 elementos, con funciones de interpolación de segundo orden para la velocidad y de primer orden para la presión. Por lo tanto se utiliza el método de residuos ponderados de Galerkin. La resolución del sistema de ecuaciones se realiza a través del método de Picard [1].

Se impone una velocidad de fluido constante en la interfase, perpendicular a la misma y paralela al eje de simetría, dejando sin imposición los demás contornos de la fase fluida. El rango de velocidades de trabajo

abarca las velocidades de la interfase típicas en la solidificación de metales. Sobre la superficie de la partícula esférica se impone la condición de no deslizamiento.

El fluido se considera Newtoniano y en flujo laminar, ya que el número de Reynolds (Re) respecto al diámetro de la partícula, es del orden de 10^{-6} y aún menor. Se aplica el modelo bajo condiciones que resultan en interfases de solidificación planas, cóncavas y convexas.

4.2.2.1. Interfase plana

La malla construida para la interfase plana se puede ver esquemáticamente en la Figura 4.6. En esta figura se representa la partícula esférica en el fluido junto con la interfase plana. Además, se puede observar un detalle de la construcción de la malla en el canal partícula-interfase. Este modelo se simula a diferentes distancias h en un rango de separaciones comprendido entre $2R$ y 1×10^{-8} m, siendo $R = 1, 5, 10, 25$ ó $50 \mu\text{m}$.

Las fuerzas de arrastre calculadas con los campos de velocidades obtenidos se comparan con las fuerzas de arrastre calculadas mediante la ecuación de Stokes Modificada. De la comparación surge el rango de validez de las expresiones analíticas para las fuerzas de arrastre.

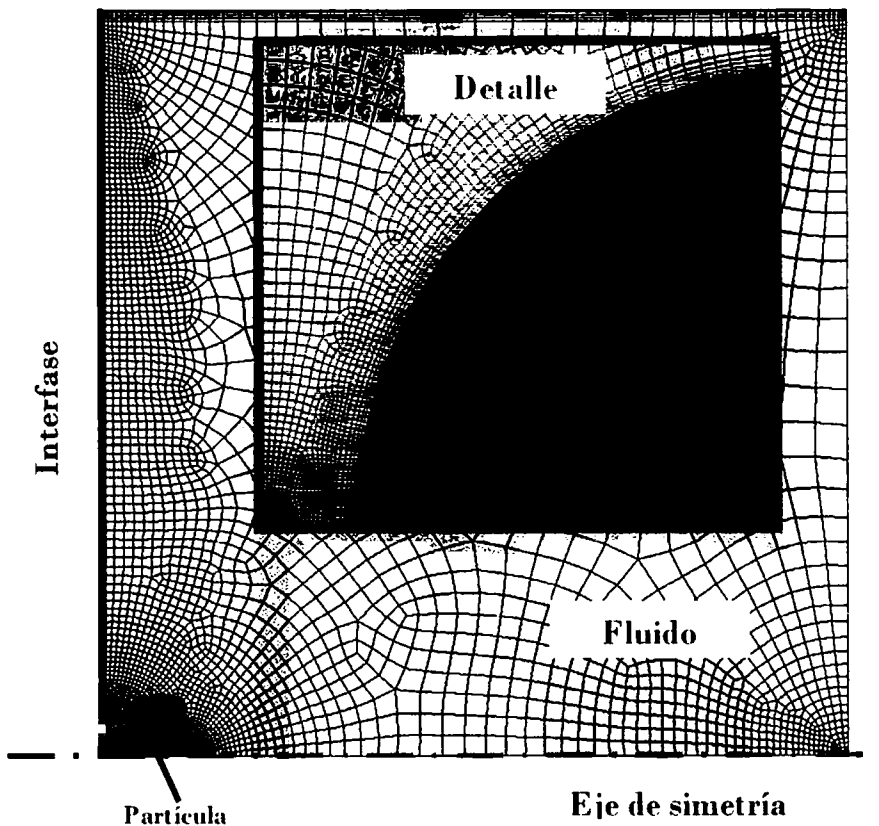


Figura 4.6: Malla del modelo de simetría axial para interfase plana. Detalle: ampliación de la región de la partícula.

4.2.2.2. Interfase cóncava

Previo a la simulación de flujo de fluidos se calcula la forma de la interfase mediante la simulación del campo térmico. Una interfase cóncava resulta en el caso de una partícula más conductora que el líquido. Una de las mallas utilizadas se muestra en la Figura 4.7. La curvatura de la interfase cambia de acuerdo a la distancia de la partícula. Se toma como interfase a la isoterma de solidificación a diferentes separaciones partícula-interfase (ver Capítulo 4.1), en un rango de separaciones comprendido entre; $2R$ y $7 \cdot 10^{-8}$ m, siendo $R = 1, 10$ ó $50 \mu\text{m}$

De un modo similar a la Figura 4.7, se construye un modelo para cada interfase calculada, por lo tanto, se construyeron diferentes mallas para cada posición de la interfase, obteniéndose así el campo de flujo de fluidos alrededor de la partícula para cada una de las interfaces calculadas. El rango de velocidades que se utiliza está comprendido entre $6 \cdot 10^{-8}$ m/s y $8 \cdot 10^{-4}$ m/s.

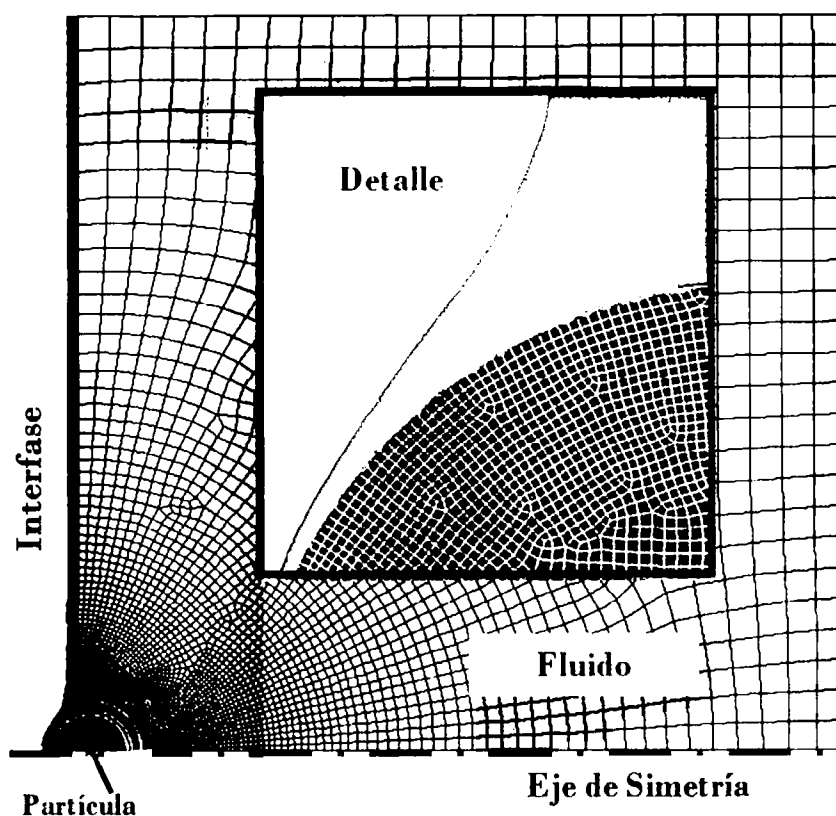


Figura 4.7: Malla del modelo de simetría axial para interfase cóncava. Detalle: ampliación de la región de la partícula.

4.2.2.3. Interfase convexa

Al igual que en el caso anterior, previo a la simulación de flujo de fluidos se calcula mediante la simulación del campo térmico, la forma de la interfase a diferentes separaciones partícula-interfase. La malla del modelo se muestra en la Figura 4.8. Las distancias partícula-interfase se calculan en un rango comprendido entre 1×10^{-8} y 1×10^{-5} m. Para cada caso se construyen diferentes mallas. A cada distancia el modelo se resuelve para diferentes velocidades de la interfase, tomando al menos 15 valores diferentes.

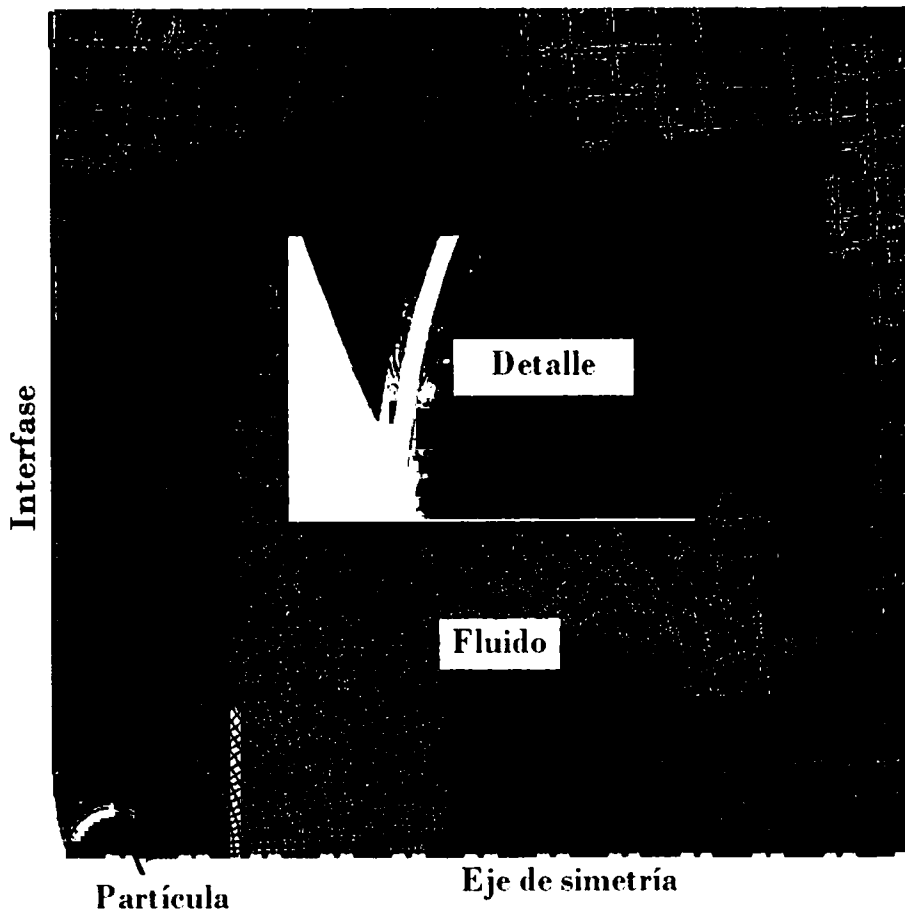


Figura 4.8: Malla del modelo de simetría axial para interfase convexa.
Detalle: ampliación de la región de la partícula

4.3 Modelos analíticos

4.3.1 Modelo para el cálculo de las fuerzas de arrastre de una interfase plana

Se consideran dos fuerzas de arrastre, una la de Stokes ($F_{aStokes}$) que describe la fuerza de arrastre de una partícula moviéndose en un fluido laminar dada por la siguiente expresión:

$$F_{aStokes} = 6 \pi \mu v_{int} \mathcal{R} \quad (4.4)$$

La otra es la de Stokes-Modificado (F_{aS-M}), y está dada por la siguiente expresión:

$$F_{aS-M} = 6 \pi \mu v_{int} \frac{\mathcal{R}^2}{h} \quad (4.5)$$

que es una modificación de la expresión de Stokes para la fuerza de arrastre sobre una esfera y se aplica para el caso donde la interfase plana se encuentra separada de la partícula una distancia h .

En ambas expresiones V_{int} : velocidad de la interfase, μ : viscosidad, R : radio de la partícula y h : distancia partícula–interfase.

4.3.2 Modelo para el cálculo de las fuerzas de repulsión en función de la forma de la interfase.

La fuerza de repulsión para cada interfase, obtenida del modelo térmico, se calcula integrando la ecuación de Casimir-Lifshitz-van der Waals (Ec. 2.7):

$$\mathcal{F}_r = 2\pi B_3 \int_0^R \frac{r dr}{h^3(r)} \quad (4.6)$$

Expresión que, para una interfase plana resulta en:

$$\mathcal{F}_r = \pi B_3 \frac{\mathcal{R}}{h^2} \quad (4.7)$$

donde r es la distancia desde el eje perpendicular a la interfase sólido-

líquida hasta la interfase sólido-líquida como se muestra en la Figura 2.3 del Capítulo 2, $h(r)$ es la separación entre la interfase y la partícula y B_3 es la constante de Casimir-Lifshitz-van der Waals que es tomada como $B_3=1 \times 10^{-21}$ J y R es el radio de la partícula.

La fuerza de repulsión se calcula a diferentes separaciones partícula-interfase. Debido a que la forma de la interfase se obtiene de los resultados del modelo térmico, no se alcanza una expresión analítica que la describa, sino solamente las coordenadas de unos cuantos puntos. Por ello, la integración de la ecuación (4.6) se realiza numéricamente. Se utilizan dos técnicas de integración numérica: i) el método del trapecio y ii) del trapecio adaptativo [1].

Referencias

1. S.C. Chapra, R.P. Canale Numerical methods for engineers, (McGraw-Hill) (2005).
2. G. F. Bolling and J. Cisse, "A theory for the interaction of particles with a solidifying front", J. Crystal Growth, 10 (1971), 56-66.
3. R. Sasikumar, T.R. Ramamohan, B.C. Pai. Critical velocities for particle pushing by moving solidification fronts. Acta Metall 1989;37(7): 2085-91
4. P. Casses, M.A. Azouni. A General theoretical approach to the behavior of foreign particles at advancing solid-liquid interfaces. Adv Colloid Interface Sci 1994;50:103-20.
5. A.W. Rempel, M.G. Worster. The interaction between a particle and an advancing solidification front. J Cryst Growth 1999;205(3):427-40.
6. D. Shangguan, S. Ahuja, D.M. Stefanescu. An analytical model for the interaction between an insoluble particle and an advancing solid/liquid interface. Metall Trans 1992;23A(2):669-80
7. L. Hadji, A.M.J. Davis, "The influence of insoluble spherical particles on the stability of a planar solidifying interface", Journal of Crystal Growth Vol 191, Issue 4, 1 August 1998, Pages 889-896
8. L. Hadji, Modelling and Asymptotic Analysis of Particle-Interface Interaction Mathematical and Computer Modelling 36 (2002) 147-156
9. J. K. Kim and P. K. Rohatgi, The effect of the diffusion of solute between the particle and the interface on the particle pushing phenomena, Acta mater. Vol. 46, No. 4, pp. 1115-1123, 1998
10. A.M. Zubko, V.G. Lobanov, V.V. Nikonova. Reaction of foreign particles with a crystallization front. Sov Phys Crystallogr 1973; 18(2):239-41.
11. M.K. Surappa, P.K. Rohatgi. Heat Diffusivity criterion for the entrapment of particles by a moving solid-liquid interface. J Mater Sci 1981;16(2):562-4.
12. A. A. Chernov and D. E. Temkin 1976 Crystal Growth and Materials. Ed. by E. Kaldis and H. J. Sheel. (North Holland, Amsterdam, 1977) pp 3-77.

- 13.M.A. Azouni, P. Casses. Thermophysical properties effects on segregation during solidification. *Adv Colloid Interface Sci* 1998; 75(2):83–106.
- 14.K.V Sharp; R.J Adrian, Transition from laminar to turbulent flow in liquid filled microtubes, *Exp. Fluids* 38:1.
- 15.K Travis.; B Tood.; D. Evans, Departure from Navier–Stokes hydrodynamics in confined liquids, *Phys. Rev. E* 55,(1997), 4288.
- 16.R. L. Daugherty, A.C. Ingersoll. “Mecánica de los fluidos”;(1964), p.348.

Capítulo 5 Resultados

En este capítulo se expondrán los resultados de los modelos térmicos, de flujo de fluidos y de repulsión que dan información sobre la forma de la interfase, la fuerza de arrastre y la fuerza de repulsión, respectivamente. Finalmente, se combinarán los resultados de cada modelo para estudiar el proceso de repulsión.

Previamente, se mostrarán los resultados de los estudios de sensibilidad y convergencia llevados a cabo para medir el grado de influencia que tienen las simplificaciones de las geometrías, la discretización del dominio y del tiempo, así como de los parámetros físicos utilizados como datos en los modelos.

5.1 Análisis de sensibilidad de los modelos

Un análisis de sensibilidad de los modelos contribuye en la determinación de los parámetros y simplificaciones más adecuadas para cada modelo buscando realizar los cálculos en tiempos apropiados a las herramientas computacionales disponibles. Los parámetros que se consideran son: tamaño de malla, tamaño de paso de tiempo, además de las simplificaciones por simetría que incluyen a modelos tridimensionales y de simetría axial.

En el modelo térmico, se compara la influencia de las simplificaciones por simetría al considerar en un modelo de simetría axial una partícula esférica y un cilindro infinito. Esta comparación se realiza para evaluar las diferencias que existen al emplear el modelo de cilindro infinito, que es el utilizado ampliamente en la literatura [1-5], con respecto a una esfera. En el modelo de flujo de fluidos no se analiza la sensibilidad al tamaño del paso de tiempo ya que los cálculos son para estado estacionario. Por otro lado se valida el modelo de simetría axial, comparando los resultados con un modelo tridimensional.

El modelo tridimensional, si bien reproduce fielmente el dominio, requiere de una gran cantidad de elementos y un gran esfuerzo al momento de construir la malla; en cambio, el modelo de simetría axial requiere de un menor número de elementos y esfuerzo, lo cual se traduce en una menor demanda de recursos de memoria y un menor tiempo de cálculo.

5.1.1 Comparación entre los modelos de simetría axial para partícula esférica y cilindro infinito

Se comparan los resultados de las simulaciones del modelo térmico considerando un dominio con simetría axial para partícula esférica y cilindro infinito. Las dimensiones y parámetros relevantes para ambos sistemas se muestran en la Tabla 5.1

Tabla 5.1 Dimensiones y parámetros relevantes utilizados en el modelo de simetría axial para partícula esférica y cilindro infinito

MAGNITUD	VALOR
Radio de la partícula	50 μm
Densidad del fluido	2700 kg/m^3
Viscosidad	1,5x10 ⁻³ Pa.s
Velocidad de extracción del calor	de 12500 J/m ² s
Tamaño del dominio utilizado	Esfera: rectángulo de 1000 μm en el sentido radial , 2000 μm en el sentido axial Cilindro: cuadrado 2000 μm x 2000 μm .
Malla	Esfera: ver Figura 4.4, Capítulo 4 Cilindro: ver Figura 4.3, Capítulo 4

Se analiza el caso de una partícula más conductora que el medio circundante que es el caso más crítico $k_P=1000$, $k_L=100$, ya que existe mayor superficie de interacción partícula-interfase, y por lo tanto, una mayor deformación de la interfase.

En la Figura 5.1 se superponen las isoterms para el modelo de partícula esférica con las del modelo para cilindro infinito. En dicha figura se observa que para h menores que $2,22 \times 10^{-4}$ m las isoterms obtenidas son diferentes de la siguiente forma: las isoterms del modelo de partícula esférica son más planas que las correspondientes al modelo para cilindro infinito. En la Figura 5.2 se muestran los resultados de la comparación de partículas de $50 \mu\text{m}$ de radio para (a) $h=2,4 \times 10^{-5}$ m, (b) 1×10^{-5} m; (c) $7,3 \times 10^{-6}$ m, (d) $4,89 \times 10^{-6}$ m, (e) $2,9 \times 10^{-6}$ m; (f) 1×10^{-6} m.

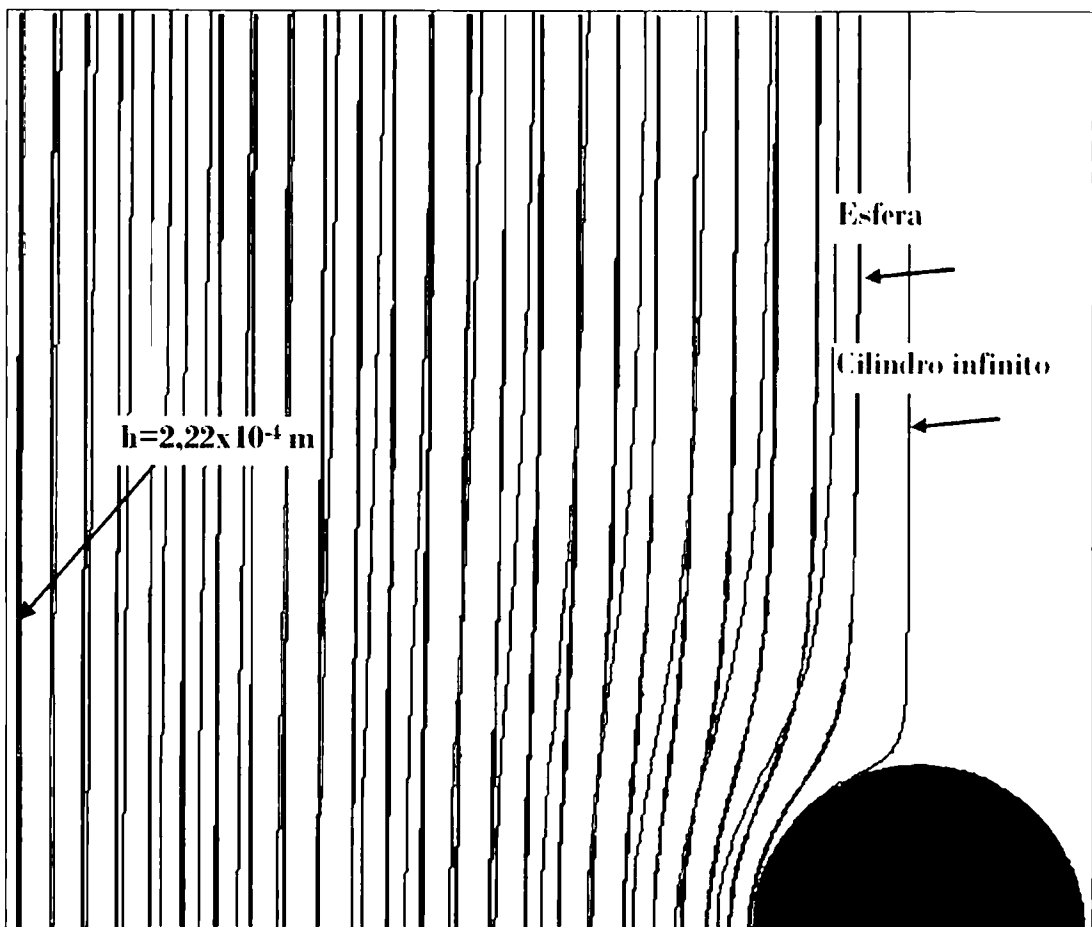


Figura 5.1 Forma de las isoterms a diferentes posiciones $h(r)$ superpuestas del modelo de partícula esférica y del modelo de cilindro infinito.

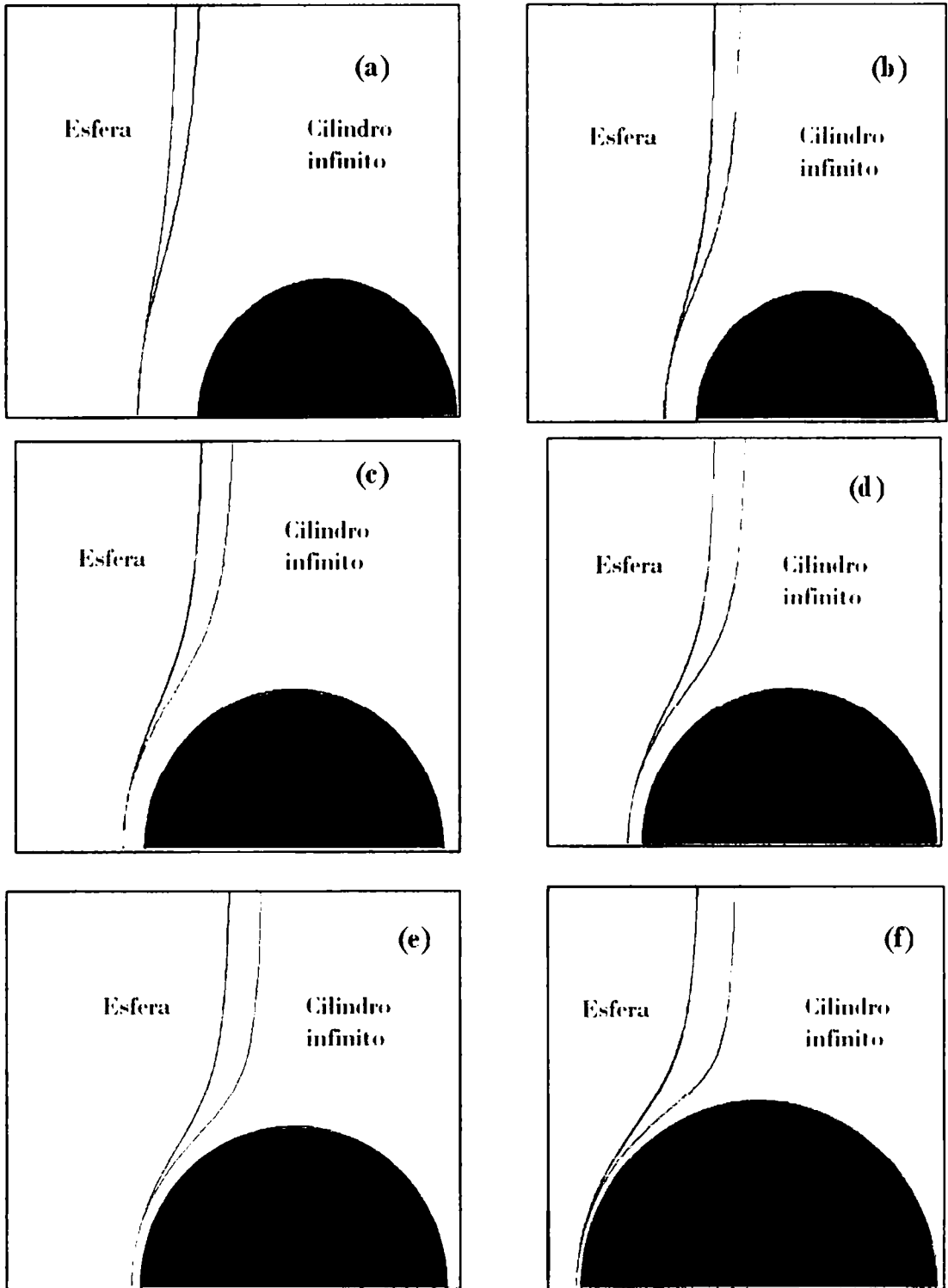


Figura 5.2. Comparación de la isoterma de solidificación del modelo para partícula esférica y para cilindro infinito
a) $h=2,4 \times 10^{-5}$ m, b) 1×10^{-5} m; c) $7,3 \times 10^{-6}$ m, d) $4,89 \times 10^{-6}$ m, e) $2,9 \times 10^{-6}$ m; f) 1×10^{-6} m.

Estas pequeñas diferencias en las interfases a pequeñas distancias varían significativamente el valor del punto de equilibrio y por lo tanto resultarán en diferencias significativas en la predicción de las velocidades críticas de solidificación del sistema en estado estacionario de repulsión cuando se emplea un modelo con partícula esférica respecto al cilindro infinito.

5.1.2 Comparación entre tamaños de malla y entre pasos de tiempo para el modelo térmico

En la sección anterior, se justificó el uso de un modelo de simetría axial y partícula esférica. A continuación se examina la sensibilidad del modelo respecto al tamaño de los elementos en la malla. El análisis se realiza en la zona más crítica donde las variables acusan mayor variación y que se da en las cercanías de la partícula. A mayor tamaño del elemento en las cercanías de la partícula, la trayectoria de la interfase es más difícil de localizar. El refinamiento mejora la precisión de la posición y forma de la interfase, pero requiere de un mayor tiempo de cálculo. El refinamiento debe ser suficiente para alcanzar un grado de detalle adecuado para seguir la trayectoria de la interfase en un tiempo razonable.

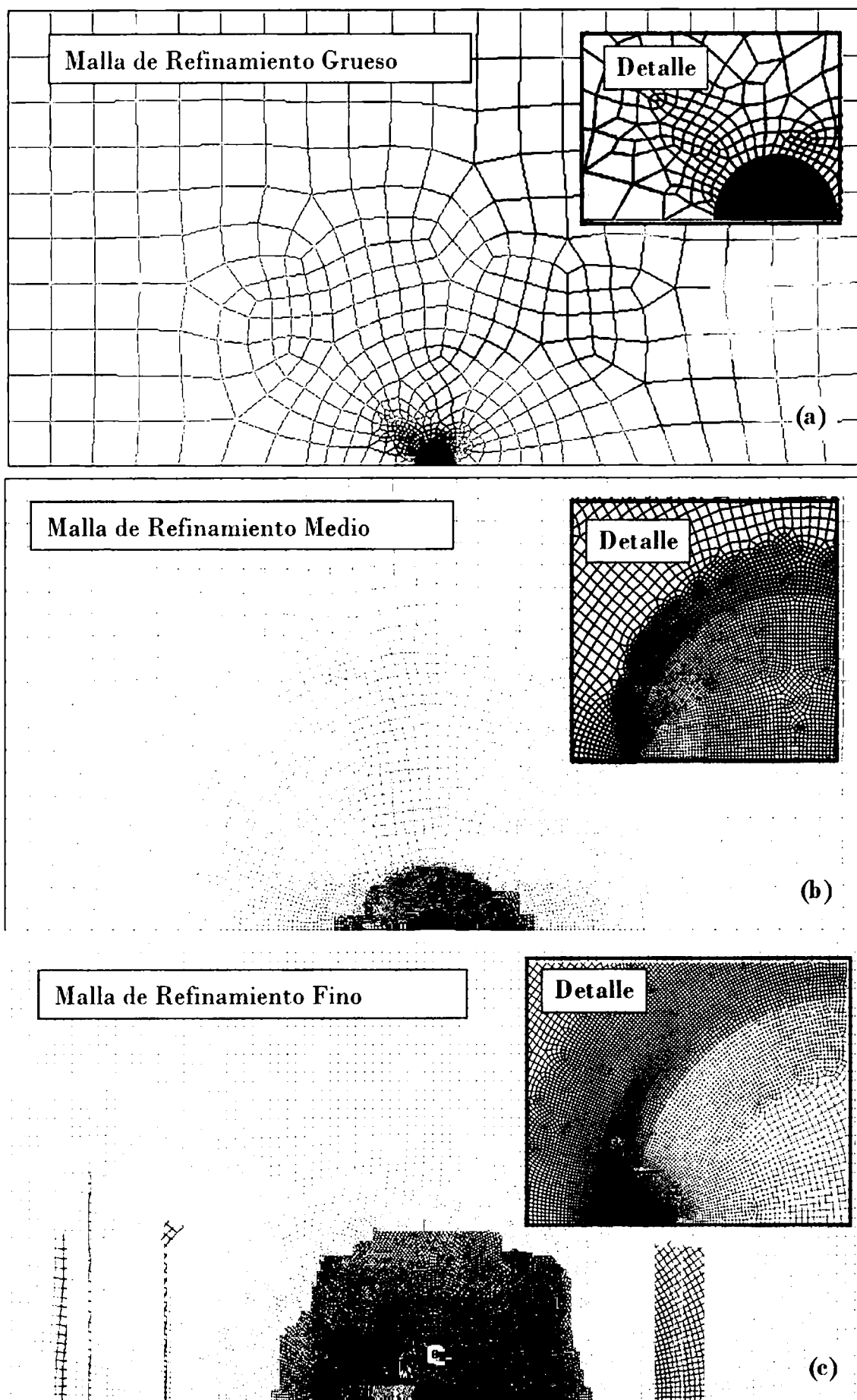


Figura 5.3. Mallas del modelo térmico con tres refinamientos: (a)grueso, (b)medio y (c) fino.

Para examinar la sensibilidad del modelo al tamaño de los elementos de la malla se comparan tres refinamientos: grueso, medio y fino. Los detalles de las mallas en las cercanías de la partícula se muestran en la Figura 5.3. La malla gruesa tiene 900 elementos, la media 14000 elementos y la fina 50000 elementos.

El refinamiento alrededor de la partícula depende del grado de precisión que se desea en la forma y posición de la interfase. Para cada uno de los tamaños de la partícula se comienza con una malla gruesa. El refinamiento es gradual y depende del grado de precisión de la interfase que se requiere. En general, en el modelo de simetría axial se emplean entre 14000 y 50000 elementos toroidales de sección cuadrilátera. Los refinamientos realizados se muestran en la Tabla 5.2.

Tabla 5.2 Refinamientos realizados para el cálculo de la Interfase Cóncava

Interfase Cóncava. Axi-Simétrica		
Malla	Nodos	Elementos
Malla 1 (gruesa)	754	824
Malla 2	1410	1497
Malla 3	5410	5577
Malla 4	5821	6004
Malla 5	6392	6623
Malla 6	7521	7775
Malla 7	10397	10696
Malla 8 (media)	13674	14053
Malla 9	49365	50087
Malla 10 (fina)	50999	51713

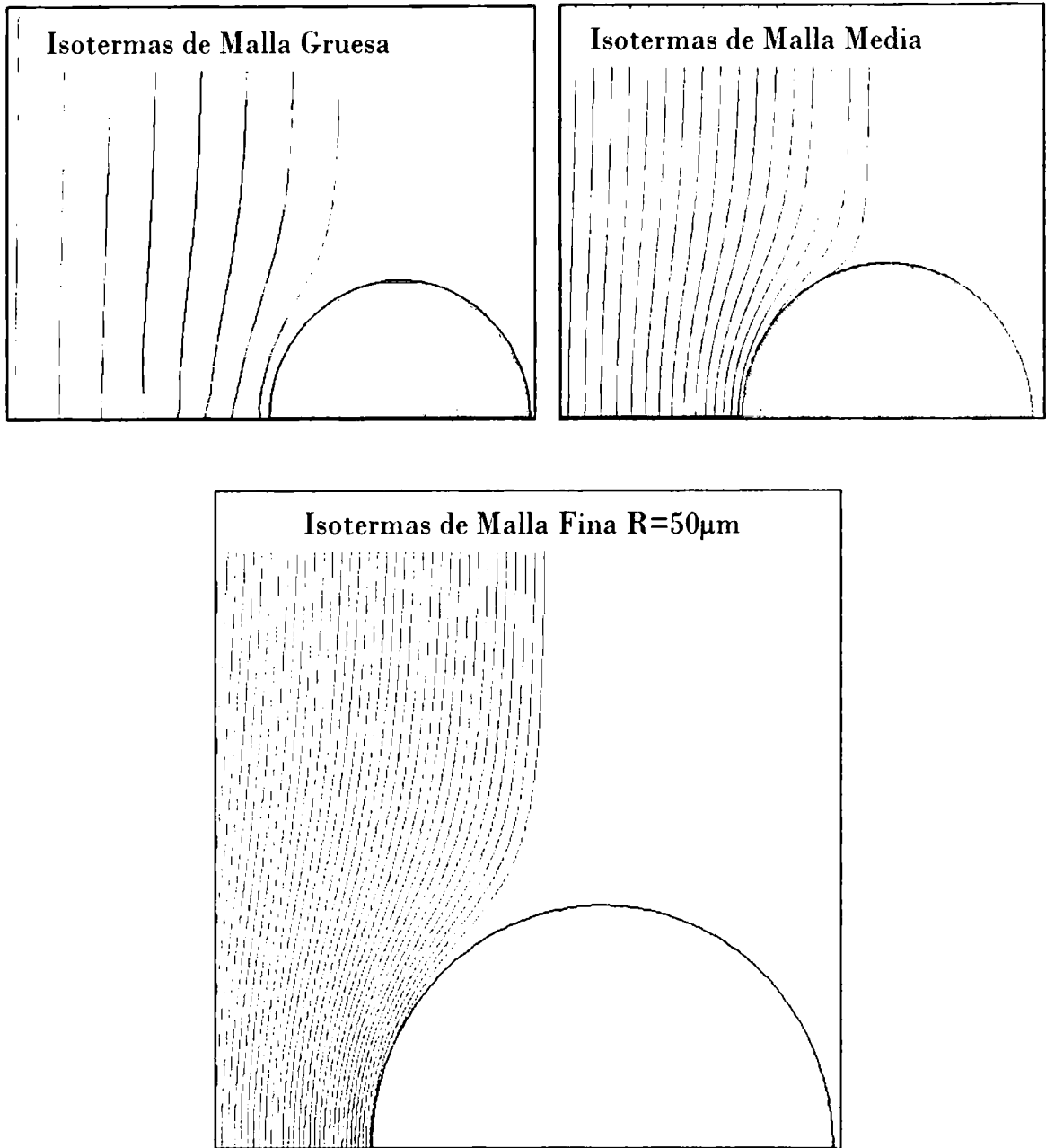


Figura5.4 Isotermas obtenidas para los tres refinamientos de mallas, y una partícula de $R=50\mu\text{m}$.

En la Figura 5.4 se muestran las isotermas obtenidas para diferentes valores de h , y los tres refinamientos; grueso medio y fino. Se puede ver que las isotermas para mallas gruesas no tienen buena definición, en las cercanías a la partícula la curvatura de la isoterma que representa la interfase no es suave,

se quiebra. A distancias mayores que $\frac{1}{4}$ de R y utilizando 14000 elementos se mejora la definición de la isoterma, pero para distancias menores es necesario tener elementos de menor tamaño para obtener mejores resultados. La mayoría de los cálculos de la forma de la isoterma se realizan a distancias menores que $\frac{1}{4}$ de R y si los elementos no son adecuados se obtienen isothermas poco suaves, con quiebres en la curvatura similares a las obtenidas cuando se utilizan mallas gruesas. Para lograr una mejor definición de la isoterma se refina el modelo en las cercanías de la partícula utilizando hasta 50000 elementos, logrando mejorar el detalle de la curvatura de la isoterma. Obtener un buen detalle de la isoterma es importante para la construcción de los modelos de flujo de fluidos. El tiempo demandado para esta malla es de 12 a 14 horas.

Paso de tiempo:

La reducción del paso del tiempo depende del grado de precisión que se desea obtener en la forma de la isoterma. Para obtener las isothermas bien definidas a distancias menores que 1×10^{-7} fue necesario reducir el paso de tiempo hasta valores de $5 \cdot 10^{-6}$ segundos. En la Figura 5.5 se muestran las interfases a medida que se reduce el paso del tiempo. En la Tabla 5.3 se muestran las reducciones de paso del tiempo realizadas en las simulaciones.

Tabla 5.3 Reducciones de paso del tiempo realizadas en las simulaciones.

Simulación	Paso de tiempo
Step 1	5,00E-04
Step 2	5,00E-05
Step 3	5,00E-06
Step 4	1,00E-06

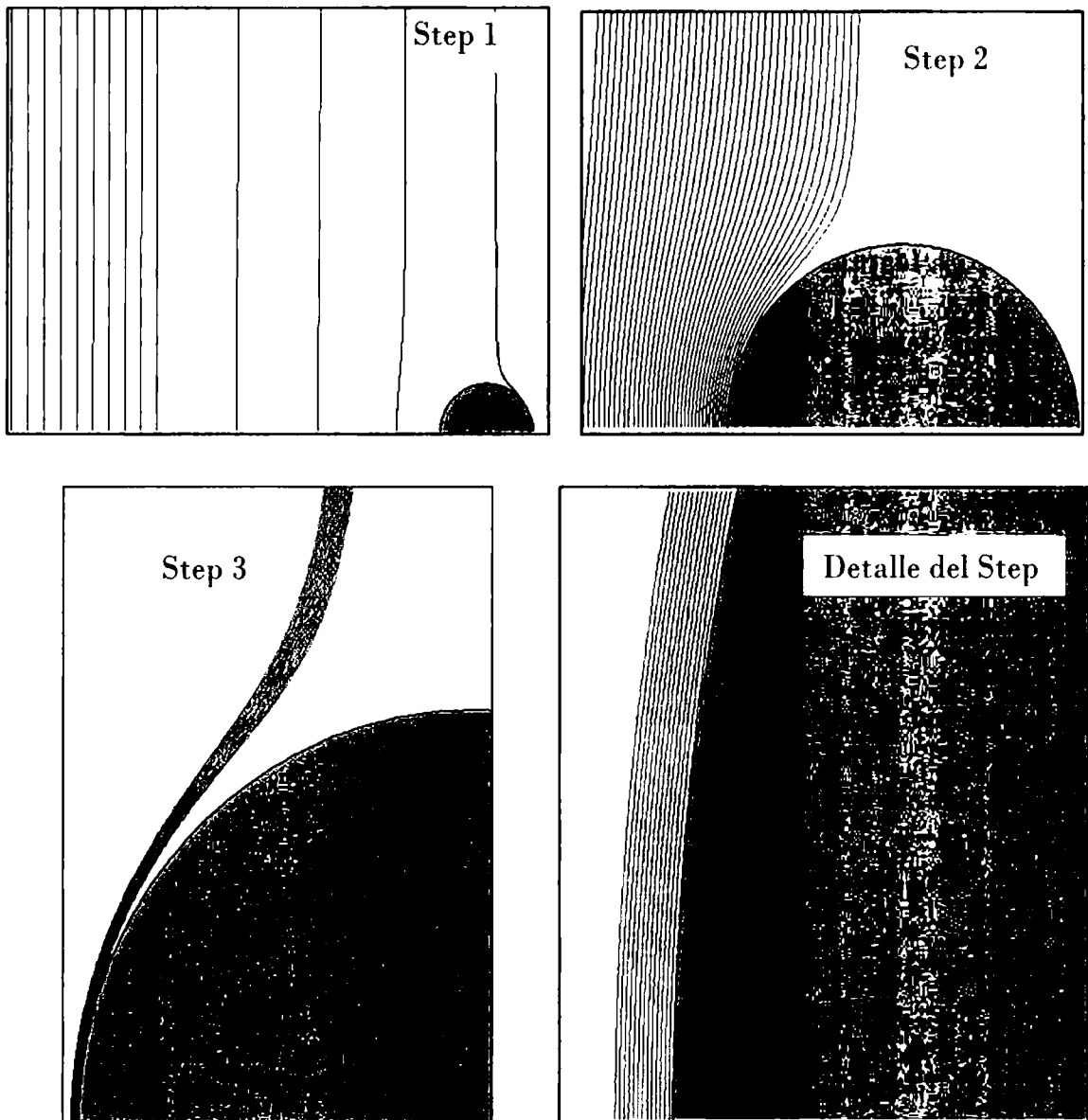


Figura 5.5 Forma de las isothermas a medida que se reduce del paso del tiempo.

5.1.3 Comparación entre los modelos de simetría axial y tridimensional

Se realizaron comparaciones entre los resultados de los campos de fluidos entre los modelos; uno con mallado axi-simétrico y otro con mallado tridimensional.

Los valores usados en las simulaciones para el campo de velocidades de un modelo tridimensional y un modelo de simetría axial se muestran en la Tabla 5.4.

Tabla 5.4 Valores usados en los modelos de simetría axial y tridimensional.

VARIABLE	VALOR
Radio	50 μm
H	10 μm
densidad	2700 kg/m^3
Viscosidad	1,5x10 ⁻³ Pa.s
Velocidad inicial en todo el fluido	3,3x10 ⁻⁸ m/s
Velocidad en la interfase	3,3x10 ⁻⁸ m/s
Forma de la interfase	Plana
Tamaño del dominio utilizado	Axi: plano meridiano de 1000 μm en el sentido radial , 1000 μm en el sentido axial Tridimensional: cilindro 1000 μm de diámetro y 500 μm en el sentido axial.
Malla	Axi: ver figura 4.6 Tridimensional ver Figura 4.5

Si bien la altura en el sentido axial no es igual en ambos diseños, es lo suficiente para que la partícula no perturbe el flujo en esa zona. Esta diferencia se debe a que si el modelo tridimensional tuviera las mismas dimensiones que el modelo axi-simétrico la cantidad de elementos se hace excesiva y el tiempo de resolución muy largo. Los resultados de las simulaciones para el campo de velocidades para ambos modelos se muestran en la Figura 5.6. En ambas figuras se observa que la máxima velocidad se encuentra entre la esfera y la interfase. Esto es debido a que el fluido que

circula por esa zona debe además alimentar a la región central, en tanto que a la izquierda de la partícula se desacelera y no presenta zonas de recirculación. La velocidad máxima para el modelo tridimensional es $4,96 \times 10^{-8}$ m/s y para el modelo de simetría axial es $4,82 \times 10^{-8}$ m/s.

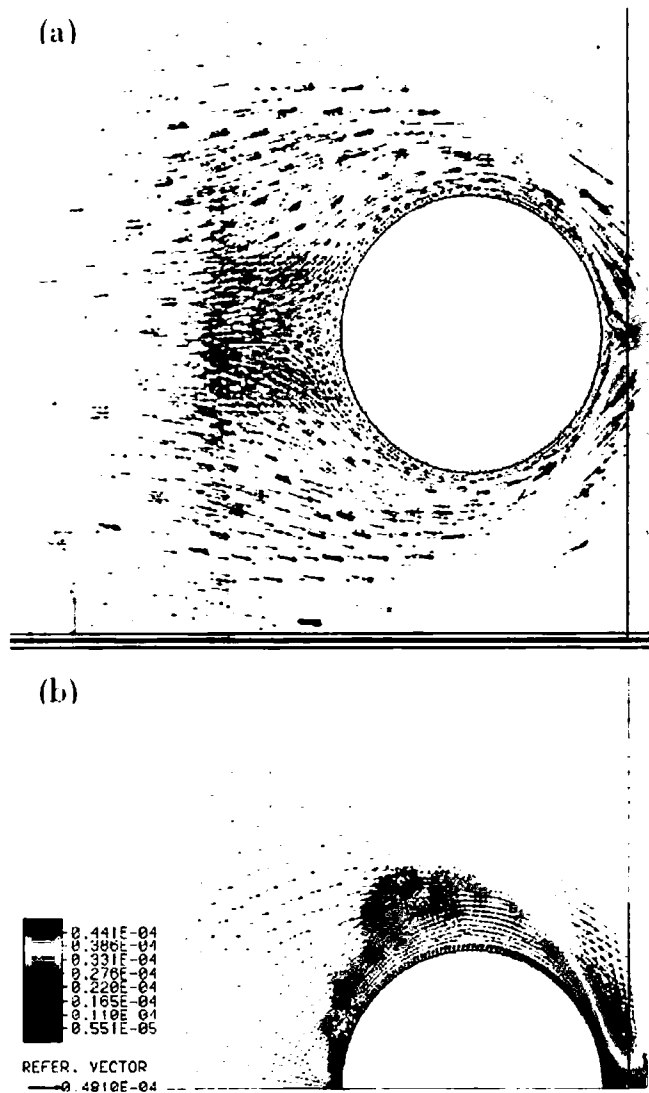
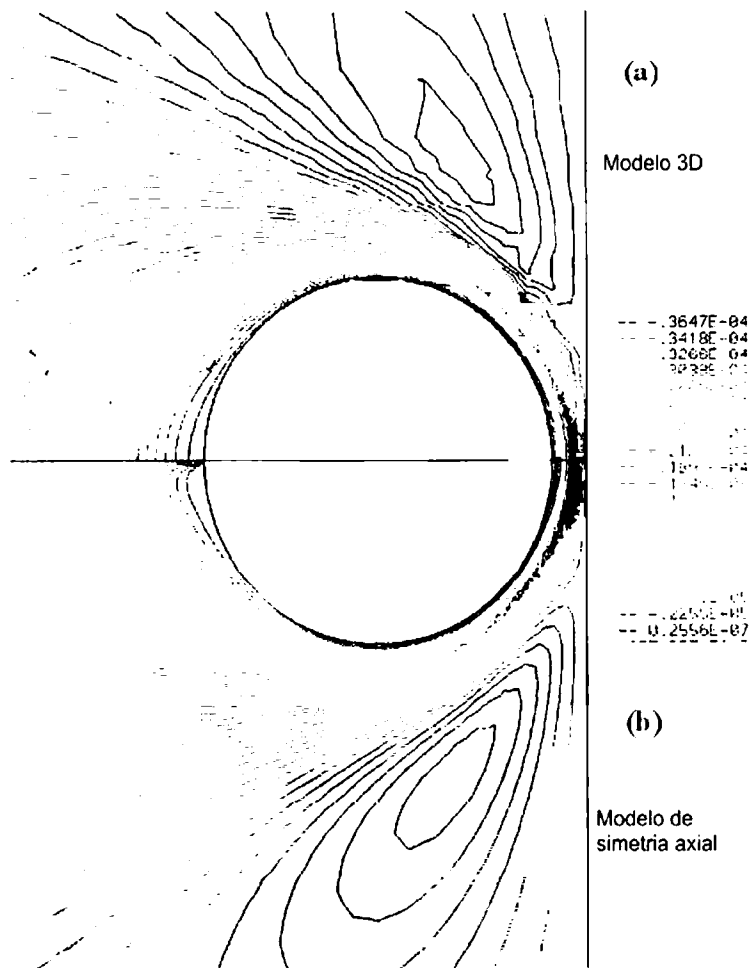


Figura 5.6: Campo de velocidades en el plano radial. Modelos: (a) Tridimensional (b) Simetría axial. La interface esta ubicada a la derecha en ambas figuras.

Mirando con más detalle a la izquierda de la partícula se puede observar en las Figuras 5.6 (a) y 5.6 (b) una ligera diferencia en el campo de velocidades. En el modelo tridimensional se observa una desaceleración

gradual en el sector de la línea central, mientras que en el modelo de simetría axial se observa una ligera alteración del flujo cerca de la partícula. Esto se debe al modelo matemático utilizado en el diseño de simetría axial, que asigna una componente no nula de la velocidad en la línea central. A pesar de esa diferencia en las condiciones de contorno particular del modelo de simetría axial la máxima velocidad en ambos modelos coincide en magnitud, dirección y posición. Se puede observar que la perturbación radial que ocasiona la partícula en el campo de velocidades es mínima.



tridimensional y de simetría axial son coincidentes excepto en dos regiones fácilmente distinguibles. Una de ellas es la zona situada a la izquierda en el dibujo, próxima a la partícula. Esta pequeña perturbación se debe a la condición de contorno particular del modelo de simetría axial mencionado anteriormente. La otra zona es en la parte superior derecha sobre la partícula. En el dibujo se ven diferencias en el trazado de las líneas, las cuales se deben a una diferencia en el tamaño de los elementos en las mallas utilizado en cada caso que, salvando los errores de interpolación, se puede ver que son iguales.

Las similitudes de los flujos en ambos modelos pueden confirmarse calculando la fuerza de arrastre sobre la partícula, así se obtienen: $2,952 \times 10^{-13}$ N en el modelo tridimensional y $2,956 \times 10^{-13}$ N en el modelo de simetría axial. Mostrando una diferencia del 0,13%.

Los tiempos de cálculo demandados en la resolución del problema en una computadora PC estándar fueron de: aproximadamente 5 horas para el modelo tridimensional y 20 minutos para el modelo de simetría axial con similar precisión en los resultados.

Por lo tanto se opta por utilizar el modelo de simetría axial para la simulación del flujo y se utiliza en el cálculo del flujo de fluidos para obtener las fuerzas de arrastre que actúan sobre una partícula.

5.1.4 Refinamiento de malla para el modelo de flujo de fluidos

A continuación se examina la sensibilidad del modelo de fluidos al tamaño de los elementos en la malla. La zona más crítica es aquella donde las variables acusan mayor variación y se da entre la partícula y la interfase. A mayor tamaño del elemento, el campo de velocidades se calcula con una menor precisión.

Con el refinamiento se mejora la precisión pero es mayor el tiempo de cálculo. El refinamiento debe ser suficiente para alcanzar un grado de detalle adecuado para un tiempo razonable.

La malla fue construida cuidando de tener un número suficiente de elementos, pero no demasiado grande entre la interfase y la partícula que asegure un resultado de campo de velocidades coherente con el problema físico. Este número de elementos, y por lo tanto su tamaño, está condicionado por dos factores, el primero es el tiempo de cálculo y el segundo es el campo de velocidades. El parámetro utilizado para determinar el límite superior del número de elementos es el tiempo de cálculo demandado. Cuando el tiempo de cálculo medido entre las primeras iteraciones excede valores de 1 hora se reduce el número de elementos. Si el campo de velocidades que se obtiene es físicamente consistente, se toma como válida esta solución. En caso contrario se aumenta el número de elementos hasta llegar a una solución físicamente consistente. Debido al procedimiento mencionado, en esta etapa el número de mallas utilizado es variable por cada valor de h .

En la tabla 5.5 (a), (b) y (c) se listan las mallas y números de elementos utilizados a cada separación h para las geometrías de interfase plana, cóncava y convexa.

Tabla 5.5 (a) mallas y números de elementos utilizados a cada separación h para la geometría de interfase plana.

Interfase Plana		
Malla	h	elementos
Malla 1	1,00E-08	27708
Malla 2	2,00E-08	30664
Malla 3	6,74E-07	29560
Malla 4	2,50E-06	34497
Malla 5	5,00E-06	10108
Malla 6	5,50E-06	23255
Malla 7	1,00E-05	11337
Malla 8	5,00E-05	23855
Malla 9	1,00E-04	27488

Resultados. Análisis de sensibilidad de los modelos

Tabla5.5 (b) mallas y números de elementos utilizados a cada separación h para la geometría de interfase cóncava.

Interfase Cóncava		
Malla	h	elementos
Malla 1	1,82E-08	34091
Malla 2	6,60E-08	32104
Malla 3	1,45E-07	24282
Malla 4	1,00E-06	21012
Malla 5	2,50E-06	22325
Malla 6	1,00E-05	34108
Malla 7	1,51E-05	42983
Malla 8	2,09E-05	24427
Malla 9	3,70E-05	26017

Tabla5.5 (c) mallas y números de elementos utilizados a cada separación h para la geometría de interfase convexa.

Interfase Convexa		
Malla	h	elementos
Malla 1	1,82E-08	38217
Malla 2	4,70E-08	54008
Malla 3	9,76E-08	38294
Malla 4	9,76E-08	30005
Malla 5	1,44E-07	40832
Malla 6	1,44E-07	29227
Malla 7	1,44E-07	53494
Malla 8	1,44E-07	39837
Malla 9	1,69E-07	38082
Malla 10	2,70E-07	29018
Malla 11	4,10E-07	29621
Malla 12	1,16E-06	43173
Malla 13	1,45E-06	35603
Malla 14	2,40E-06	47451
Malla 15	2,40E-06	45050
Malla 16	1,10E-05	32713
Malla 17	1,28E-05	28244
Malla 18	1,56E-05	51245
Malla 19	1,56E-05	58363

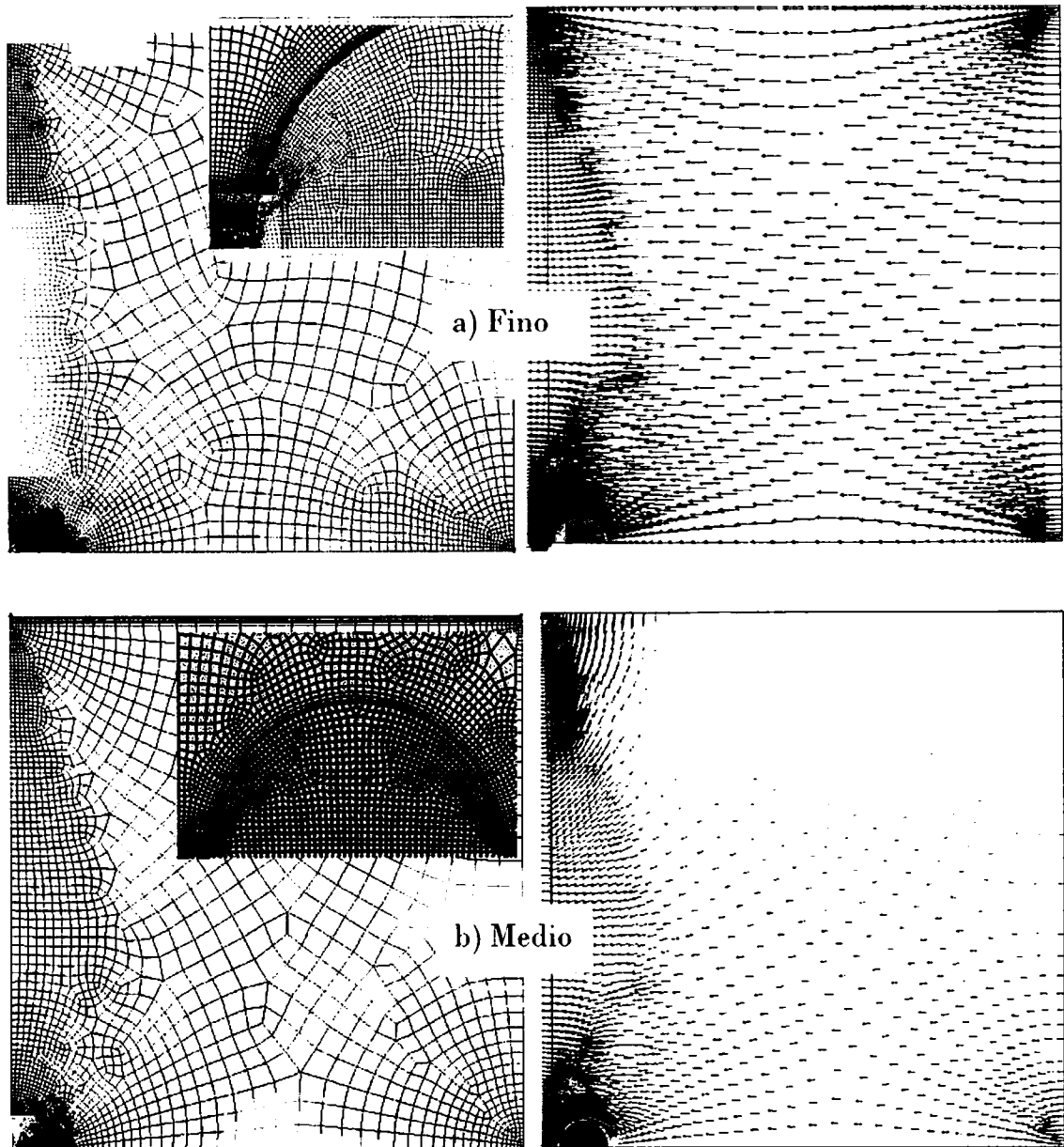
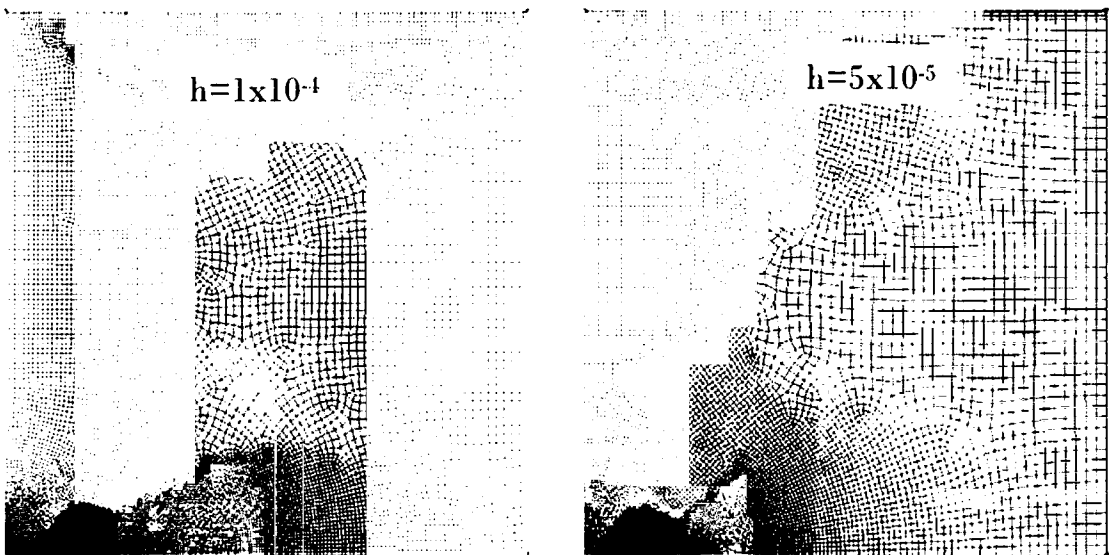


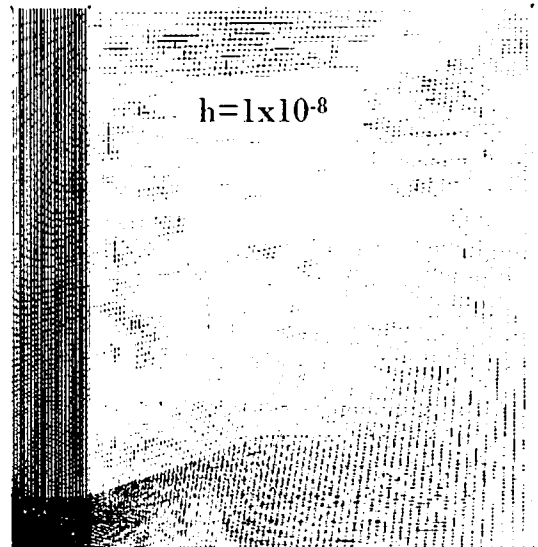
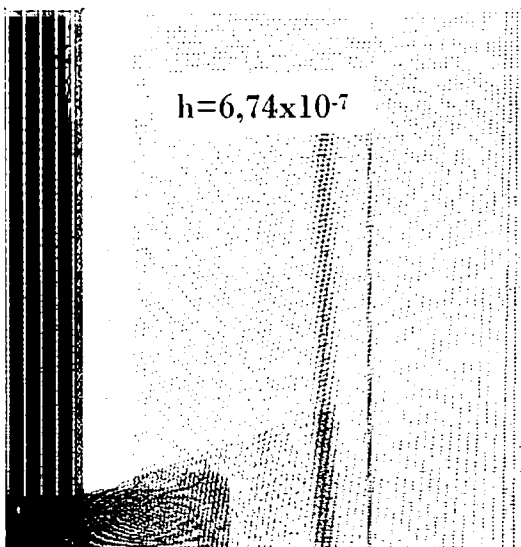
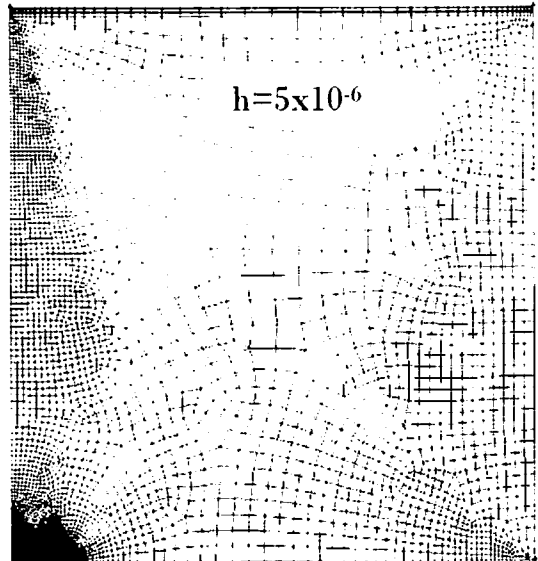
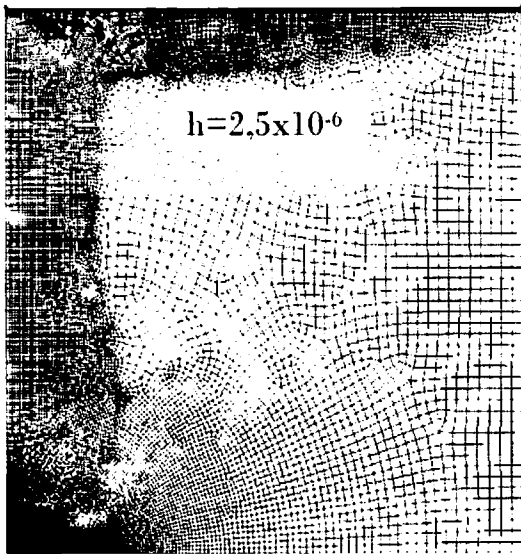
Figura 5.8 Mallas y resultados del campo de flujo de fluidos para dos refinamientos, a) Fino b) Medio; ambos para $R=50\mu\text{m}$ y $h=1 \times 10^{-5}\text{m}$.

En la Figura 5.8 se muestran dos refinamientos de mallas usadas para el caso de una interfase plana y sus respectivos resultados en el campo de flujo de fluidos $h=1 \times 10^{-5}\text{ m}$. Al comparar los resultados del campo de fluidos se puede ver en la Figura 5.8 (b) que en el caso de elementos grandes el flujo es inconsistente, se puede ver en la esquina superior izquierda como el flujo se acelera, y esto no es coherente con el modelo diseñado. En la Figura 5.9 se muestran algunas de las mallas utilizadas en las simulaciones para $R= 50\mu\text{m}$,

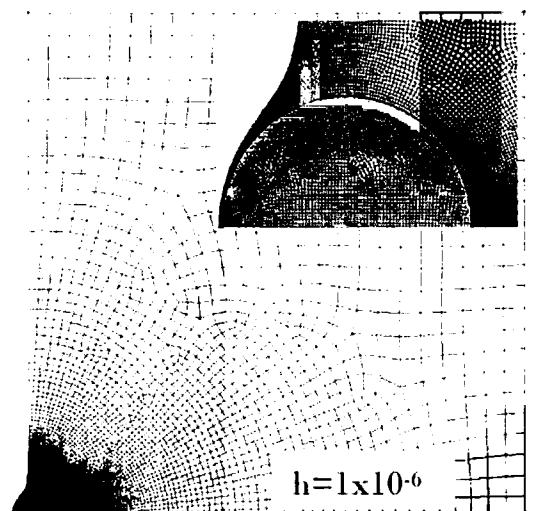
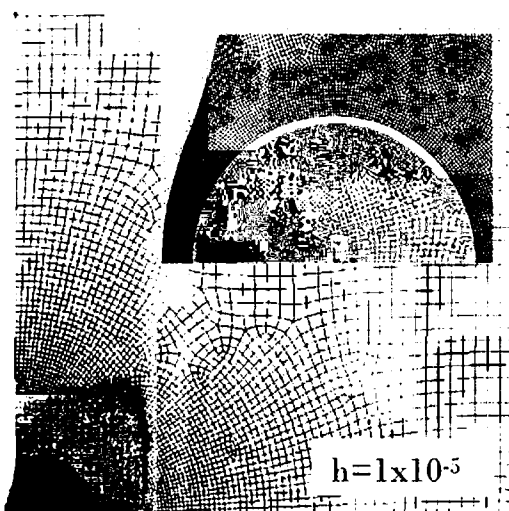
diferentes separaciones de h e interfases a) planas, b) cóncavas, y c) convexas. El menor tamaño de elemento modelado es de 1×10^{-8} m. Debido a esto, cuando se realizan los modelos para distancias menores a 1×10^{-7} y con mayor curvatura en la interfase, la construcción de las mallas, que debe ser gradual y progresiva, se vuelve más compleja. A estas distancias la cantidad de elementos utilizada aumenta considerablemente para que la transición a elementos de menor a mayor tamaño no sea grosera, y el resultado de los campos de flujo de fluidos sea uniforme. Las mallas a distancias menores que 1×10^{-7} m varían entre 45000 y 55000 elementos, y el tiempo demandado varía de 3 a 5 horas. En cambio las mallas para $\frac{1}{4}$ de R poseen 30000 elementos y el tiempo de cálculo estimado es de 30 minutos.

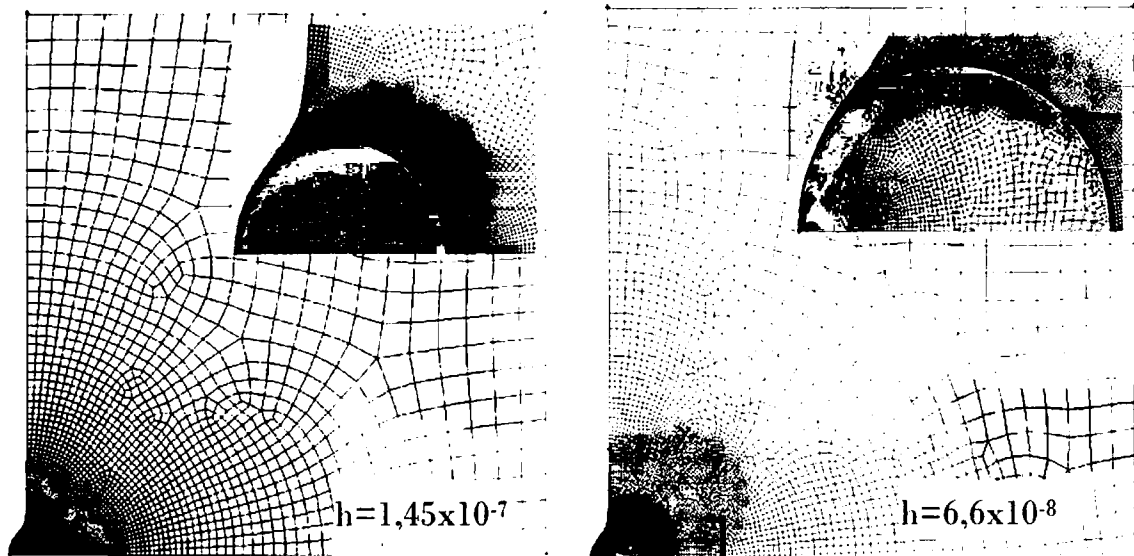
a) Mallas para interfases planas





b) Mallas para interfases cóncavas





c) Mallas para interfaces convexas

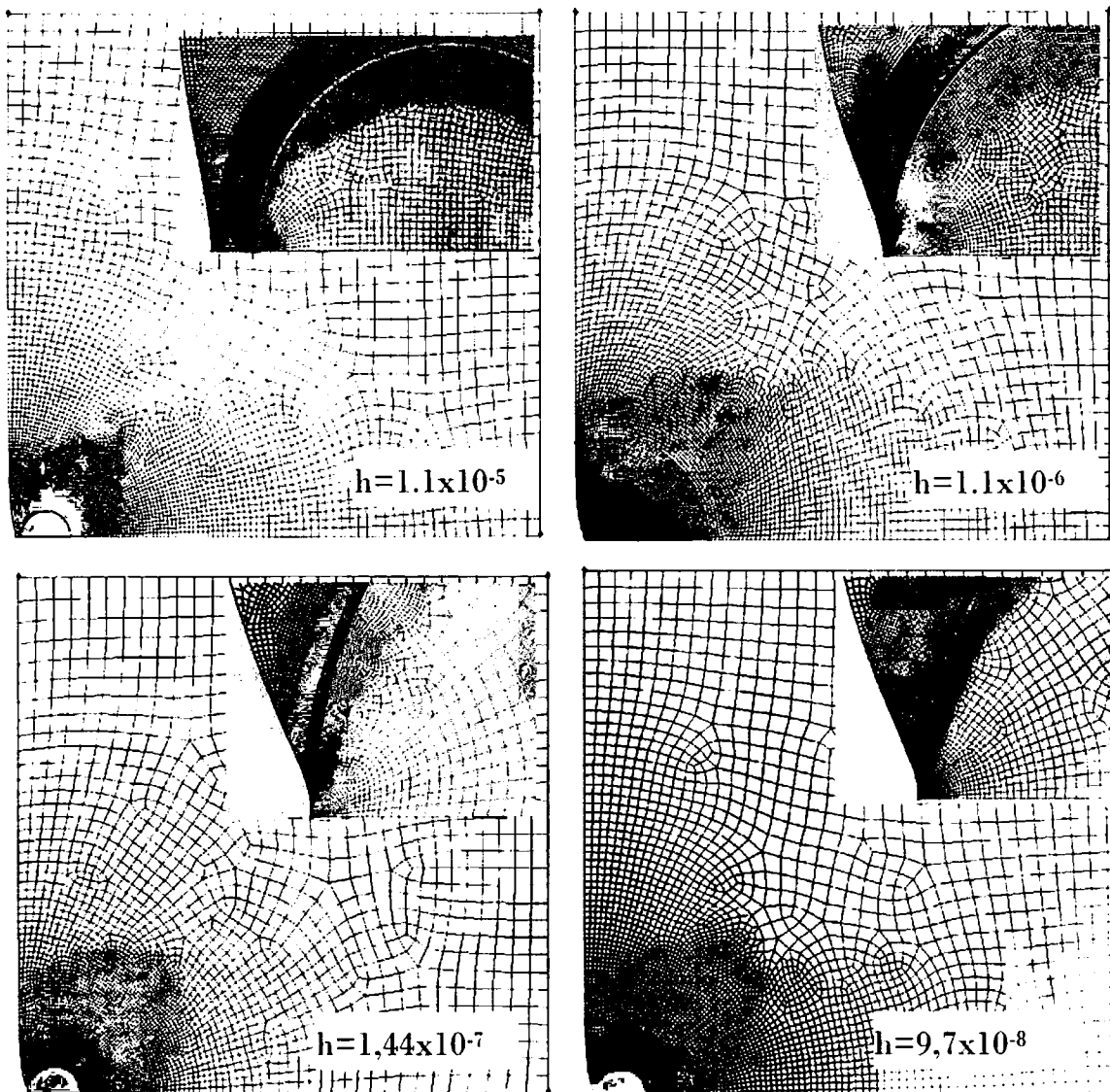


Figura 5.9. Mallas construidas para las simulaciones con $R=50\mu\text{m}$, diferentes separaciones de h e interfaces a) planas, b) cóncavas, y c) convexas.

5.2 Forma de la interfase de solidificación

A continuación se mostrarán los resultados del modelo térmico con el cual se obtuvo la forma de la interfase. En primer lugar se analizarán los resultados de la influencia de la extracción de calor, luego la influencia del tamaño de la partícula, en tercer lugar la influencia de la conductividad térmica de la partícula y finalmente la forma de la partícula.

La interfase de solidificación coincide con la isoterma correspondiente a la temperatura sólido-líquido. Se utilizaron las propiedades del aluminio, para el cual la isoterma de solidificación es de 933 K.

La partícula se modela con igual densidad que la matriz y la fase sólida con viscosidad igual a 10^6 veces la viscosidad del líquido.

5.2.1 Influencia de las Velocidades de Extracción de Calor en la Determinación de la Forma de la Interfase

El dominio en estudio está constituido por una partícula esférica de radio $R=50\ \mu\text{m}$. La relación entre las conductividades térmicas que se utiliza es k_p/k_L igual a 10.

La influencia de la extracción de calor se determinó utilizando dos valores: $12500\ \text{J/m}^2\text{s}$ y $125000\ \text{J/m}^2\text{s}$. Para la comparación de la forma de la interfase se grafica en la Figura 5.11 dos pares de interfases con valores de $h/2R$ menores a 0,1. En dicha figura se observa que la interfase que corresponde al mayor gradiente, en color azul, es más plana que la de menor gradiente dibujada en color rojo.

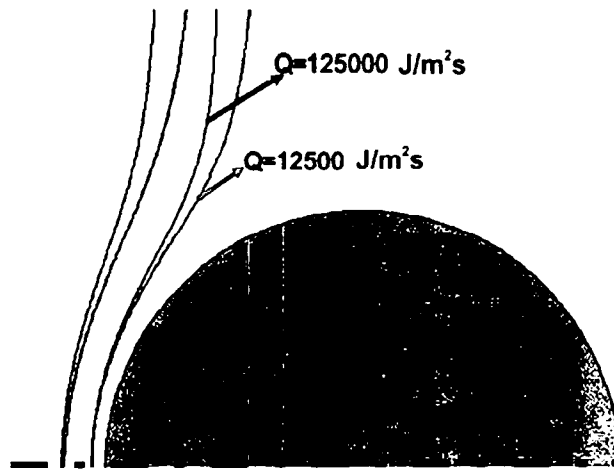


Figura 5.11. Forma de la interfase según diferentes velocidades de extracción de calor a 2 h.

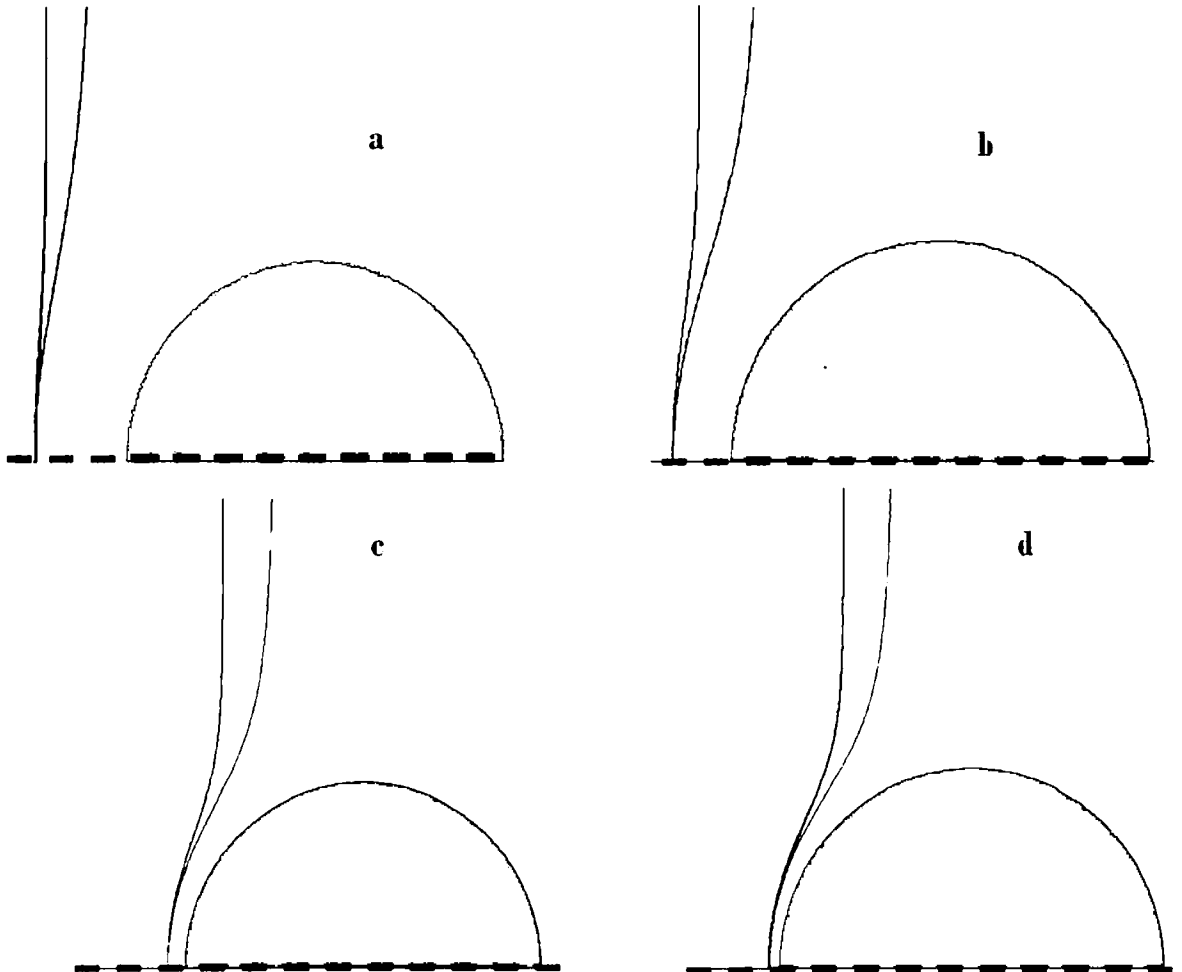


Figura 5.12 Comparación de interfases a diferentes velocidades de extracción de calor para diferentes h. a) $2,4 \times 10^{-5}$ m, b) $1,37 \times 10^{-5}$ m, c) $4,8 \times 10^{-6}$ m y d) $2,8 \times 10^{-6}$ m.

En la Figura 5.12 se comparan las interfases para los dos gradientes y valores de h iguales a $1,37 \times 10^{-5}$ m, $2,4 \times 10^{-5}$ m, $4,8 \times 10^{-6}$ m y $2,8 \times 10^{-6}$ m. En dicha figura se observa que la interfase, a medida que se aproxima a la

partícula, se vuelve más cóncava en el caso del menor gradiente de extracción calórica.

Analizando en conjunto estos resultados se observa que la interfase que corresponde al mayor gradiente de temperatura es más plana que la interfase con menor gradiente.

Cuando el gradiente es mayor la perturbación que introduce la partícula en el sistema es menor, esto se puede inferir a raíz de que la interfase es más plana, por lo tanto el sistema es más estable. Cuando el gradiente es mayor la estabilidad del sistema mejora, y por lo tanto, se recupera más rápido de cualquier perturbación respecto al caso de gradientes menores.

Se elige $12500 \text{ J/m}^2\text{s}$ porque es la condición que más deforma la interfase y con esto se intenta mostrar los casos donde existe mayor interacción entre partícula e interfase en los modelos.

5.2.2 Influencia del tamaño de partícula en la forma de la interfase

El objetivo de este estudio es escalar el sistema construido para partículas de $50 \mu\text{m}$ de radio y utilizarlo para otros tamaños de partículas. La velocidad de extracción que se emplea es $12500 \text{ J/m}^2\text{s}$ y la relación de conductividades térmicas $k_P/k_L=10$. Se comparan los resultados de las isothermas de solidificación para 2 radios de partículas de 10 y $50 \mu\text{m}$. En la Figura 5.13 se superponen los resultados para estos dos tamaños de partículas, a dos distancias equivalentes para evaluar la influencia del tamaño de la partícula en la forma de la interfase.

La comparación de las simulaciones se realiza utilizando un escalado para ajustar los tamaños de partículas y las interfases. El proceso de escalado se realiza tomando los resultados de la simulación de $10 \mu\text{m}$ y superponiéndola con los resultados de la simulación de $50 \mu\text{m}$, de manera tal que los tamaños de las partículas sean iguales.

En las Figura 5.13 a y b se muestran dos casos donde se escala y se comparan las interfases de ambas simulaciones a una distancia equivalente de h ., en la Figura 5.13a al valor de $h/2R$ igual a 0,05 y en la Figura 5.13b al valor de $h/2R$ igual a 0,01. En cada figura se observa que las interfases están superpuestas, y se ve una línea única de interfase, lo que indica que las mismas coinciden, tiene la misma forma. Estas comparaciones se hicieron desde distancias de $h/2R$ correspondientes a interfases planas hasta valores cercanos a la partícula.

Los resultados de estas comparaciones indican que es posible realizar el escalado de los resultados de las simulaciones del modelo térmico. Por lo tanto, para obtener las formas de las interfases de las partículas de diferentes tamaños se utilizan los resultados del campo térmico obtenidos con una malla para una partícula de 50 μm , y luego se escalan a otros tamaños de partícula.

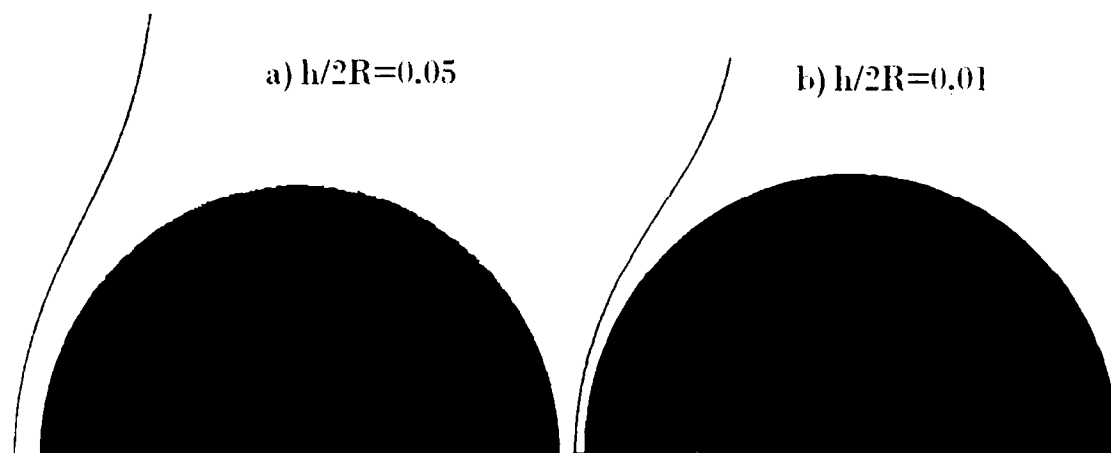


Figura 5.13. Forma de la interfase para partículas de 50 μm y 10 μm de radio, escaladas a distancias equivalentes de $h/2R$. Las interfases están superpuestas, al ser iguales se observa una única línea.

Este procedimiento de escalado se realiza para los casos de interfases curvas, ya sea cóncava o convexa. Pues son los casos donde el procedimiento de cálculo de la forma de la interfase es laborioso. Para el caso de la interfase

plana también se utiliza el escalado, particularmente para partículas pequeñas por una mejor definición en el dibujo.

5.2.3 Influencia de la conductividad térmica en la forma de la interfase

Mediante el análisis del campo térmico generado por el movimiento de una interfase de solidificación hacia una partícula esférica se aprecian deformaciones de la interfase en relación con las propiedades térmicas de la partícula en una matriz sólido-líquida.

Como se mencionó en la Sección 4.1 se consideran tres relaciones de conductividades térmicas k_P/k_L : 0,1; 1 y 10, las cuales corresponden a partículas aislantes, iguales y más conductoras del calor que el medio, respectivamente. La velocidad de extracción que se emplea es $12500 \text{ J/m}^2\text{s}$ y el tamaño de partícula $R=50 \text{ }\mu\text{m}$. Los resultados del campo térmico luego se escalan para partículas de $10 \text{ }\mu\text{m}$ y $1 \text{ }\mu\text{m}$ de radio.

Caso de $k_P/k_L = 1$: Interfase plana

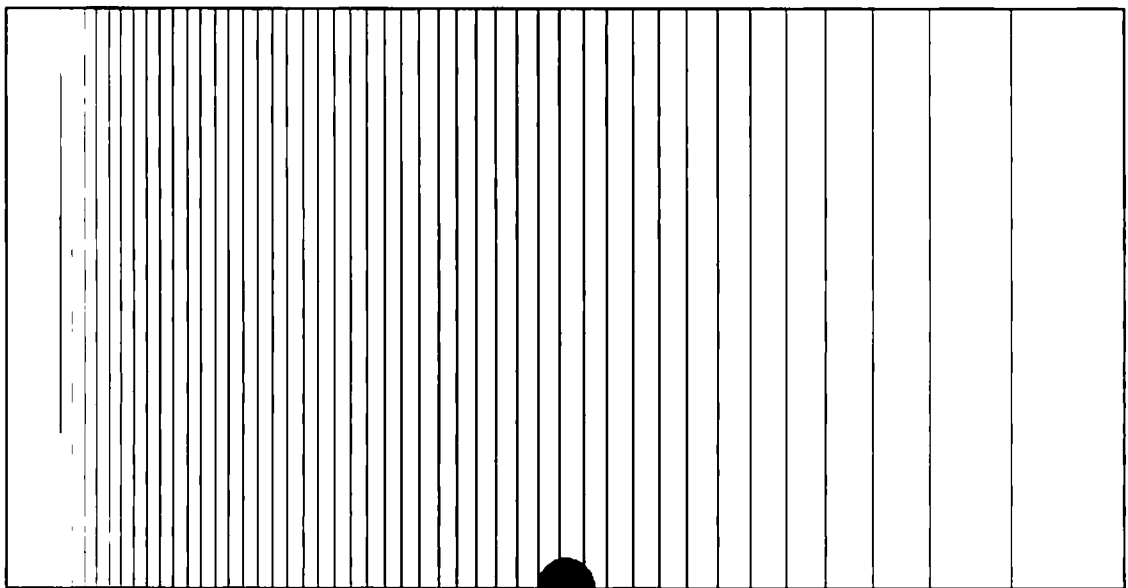


Figura 5.14 Campo térmico obtenido en un modelo axi-simétrico cuando $k_P/k_m=1$.

Se sabe que la interfase es plana cuando k_P/k_L es igual a 1 (ver Capítulo 2). En este caso la solución del campo de temperatura es conocida a priori: una interfase plana.

Para determinar cuál es el error numérico debido a la discretización y el procedimiento de cálculo se realizaron una serie de simulaciones con la relación igual a 1. Los resultados de la simulación se muestran en la Figura 5.14 y se observa que la interfase es plana por lo tanto la discretización utilizada y el procedimiento de cálculo dan resultados aceptables. Las condiciones más críticas son aquellas donde la conductividad es diferente a 1. Las cuales se discuten a continuación.

Caso de $k_P/k_L = 10$: Interfase cóncava

Los resultados cuando la conductividad térmica de la partícula es mayor que la de la matriz se muestran en la Figura 5.15. En la misma se observa la forma de la interfase en función de la distancia con respecto a la partícula.

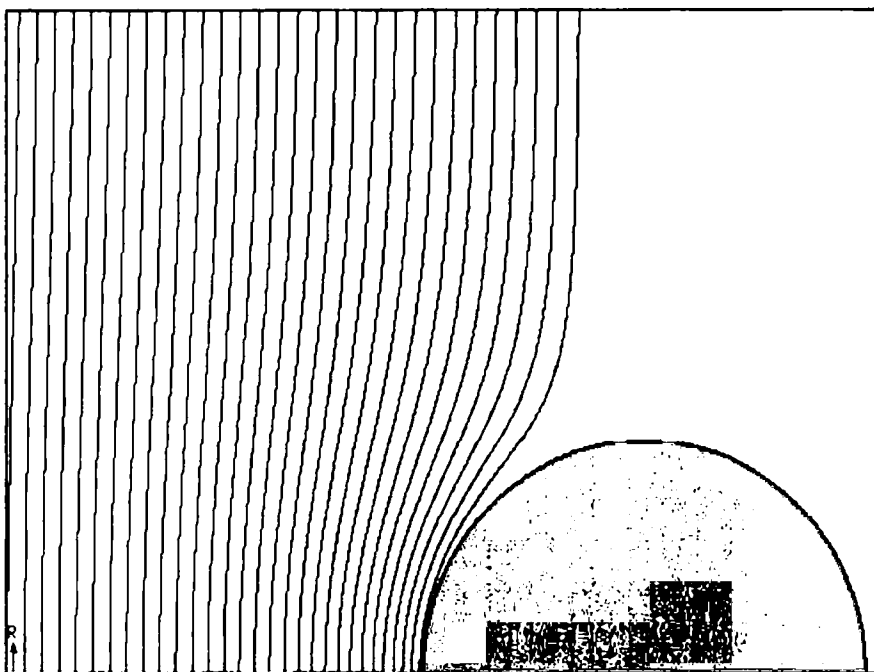


Figura 5.15 . Forma de la interfase según diferentes separaciones

Se puede ver que a distancias mayores que $2R$ la interfase es prácticamente plana y a medida que se aproxima a la partícula la interfase se

vuelve gradualmente cóncava.

Caso de $k_P/k_L = 0,1$: Interfase convexa

Los resultados del caso en el que la conductividad térmica de la partícula es menor que la matriz muestran una interfase convexa, como se puede ver en la Figura 5.16.

Los resultados de la forma de la interfase muestran que a distancias mayores que $2R$ la isoterma correspondiente a la interfase es plana y a medida que se aproxima a la partícula se vuelve gradualmente convexa.

Para cualquier valor de k_P/k_L diferente de 1 la forma de la interfase no es plana, y la curvatura depende de la distancia entre interfase y partícula. Por lo tanto es necesario el cálculo de la forma de la interfase para el posterior uso en las simulaciones de flujo de fluidos. Los mismos se calculan a distancias de $h/2R$ igual a 1 hasta valores cercanos al $h_{min}=1 \times 10^{-8}$ m. En este intervalo se determinan los campos en 5 posiciones diferentes tal como se muestra en la Sección 5.3.

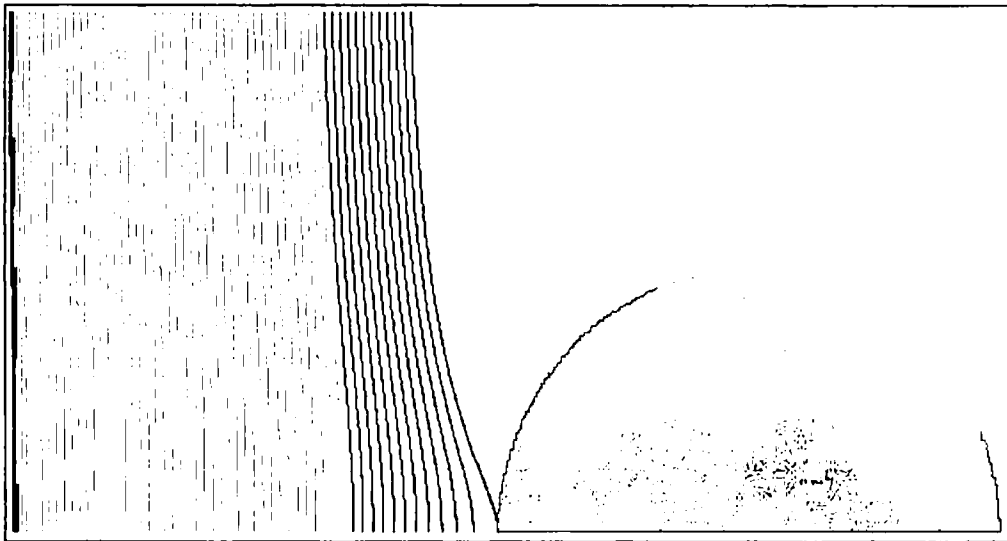


Figura 5.16. Forma de la interfase a diferentes posiciones, $h(r)$.

Los valores utilizados de k_P/k_L igual a 10 y 0.1 cubren un intervalo amplio de situaciones tales como sistemas plomo-cobre y hierro-aluminio.

5.2.4 Influencia de la forma de la partícula en la forma de la interfase

Caso de una semiesfera, comparación con la partícula esférica

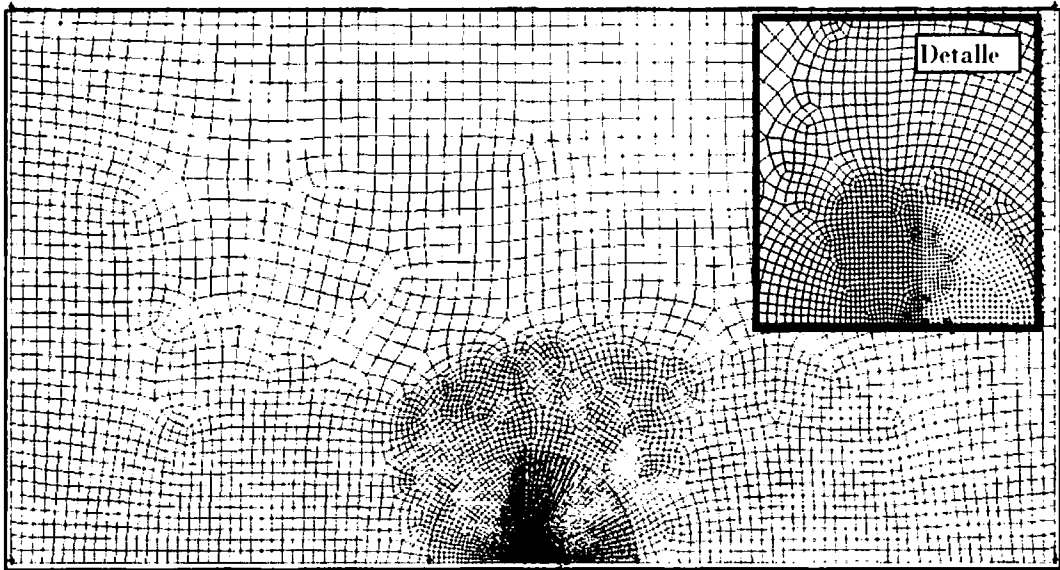


Figura 5.17 Malla empleada en el modelo térmico axi-simétrico, partícula semiesférica.

Partícula conductora

Las condiciones de contorno utilizadas son las mismas que para el caso de una partícula esférica conductora, Sección 4.1. El dominio discretizado se muestra en la Figura 5.17 que se compara con el caso de una partícula esférica que se muestra en la Figura 4.3. Las geometrías obtenidas de las interfases en cada caso se muestran en la Figura 5.18.

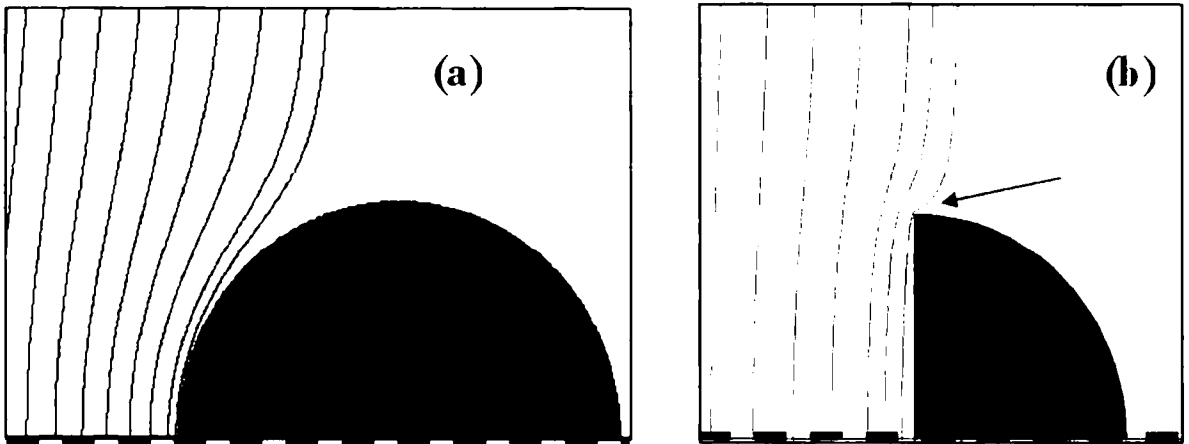


Figura 5.18. Forma de la interfase a diferentes distancias.
(a) Partícula conductora esférica (b) Partícula conductora semiesférica

En ambos casos la relación entre conductividades térmicas k_P/k_L , fue igual a 10, y se puede ver que la interfase a grandes distancias es plana y a medida que se aproxima a la partícula se vuelve cóncava, tal como se observa en la Figura 5.19. Sin embargo, una diferencia que se puede observar es que la interfase de solidificación en la partícula semiesférica posee la menor separación con la interfase en las esquinas de la semiesfera cuando esta situación para la partícula esférica ocurre en el centro de la interfase cóncava como se observa en la Figura 5.18a. En el caso de la partícula semiesférica esto resulta en un atrapamiento de líquido entre la semiesfera y el sólido. Al solidificar este líquido se contrae, lo que puede dar lugar a la generación de poros.

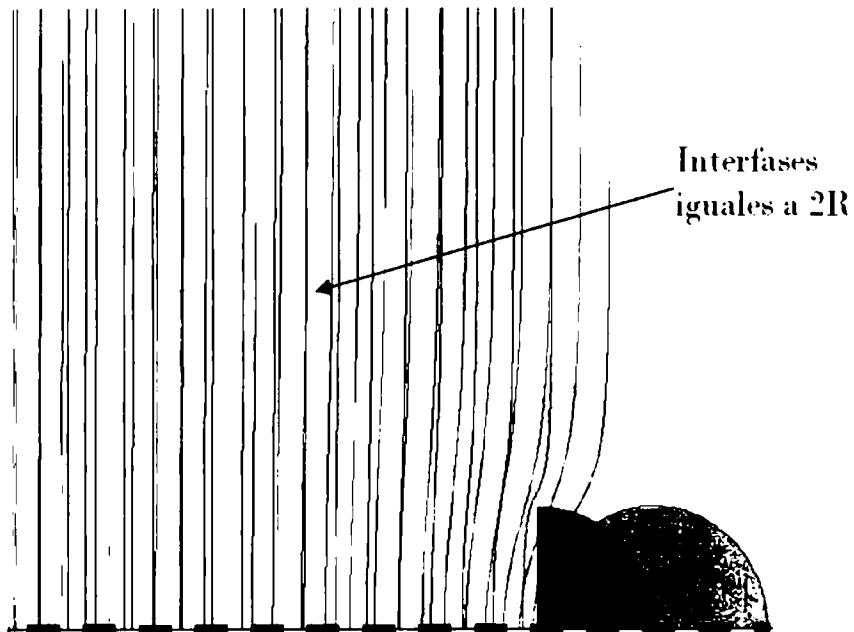


Figura 5.19 Superposición de las interfases entre una partícula conductora esférica y semiesférica.

Partícula aislante

Las condiciones de contorno utilizadas son las mismas que para el caso de una partícula esférica menos conductora que el medio, Capítulo 4.1.

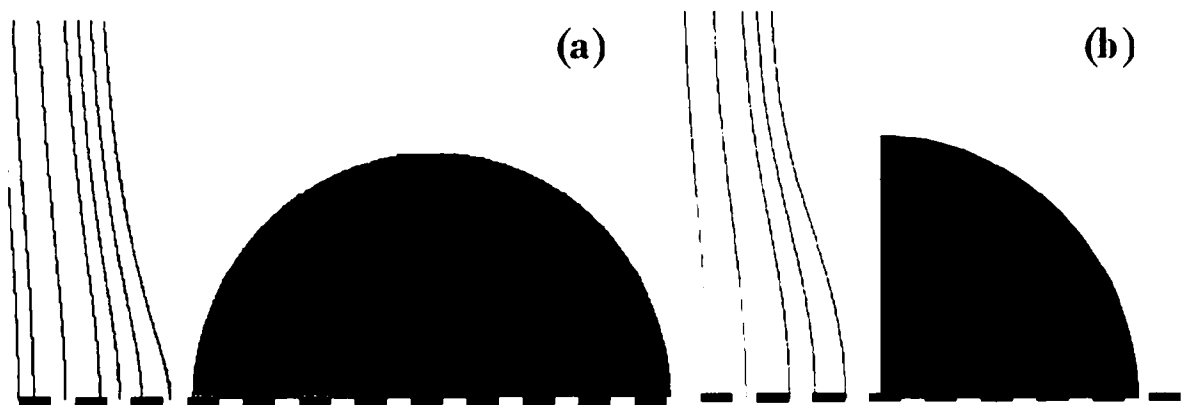


Figura 5.20. Forma de la interfase a diferentes distancias. (a) Partícula aislante esférica (b) Partícula aislante semiesférica.

El dominio discretizado se muestra en la Figura 5.17 que se compara con el caso de una partícula esférica que se muestra en la Figura 4.3. Las geometrías obtenidas de las interfases en cada caso se muestran en la Figura 5.20.

En ambos casos la relación entre conductividades térmicas fue k_P/k_L igual a 0,1. En la figura 5.21 se observa que, a grandes distancias la interfase es plana y a medida que se aproxima a la partícula se vuelve convexa. Sin embargo, una diferencia que se puede observar es que la interfase de solidificación en la partícula semiesférica a distancias menores que $\frac{1}{4}$ de R sufre mayor deformación, es menos plana que la de una partícula esférica a igual distancia de h .

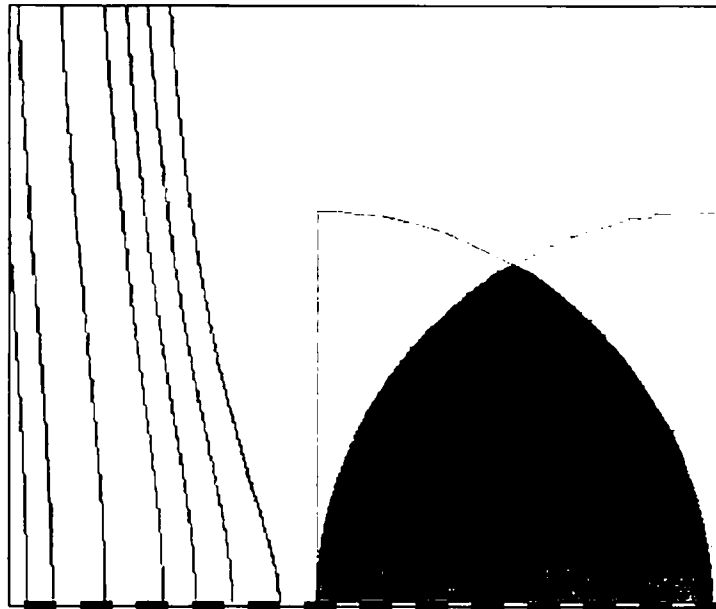


Figura 5.21. Comparación entre una partícula aislante esférica y semiesférica.

5.3 Modelo de flujo de fluidos

Los resultados de las simulaciones del flujo de fluidos que se utilizan para calcular la fuerza de arrastre que empuja la partícula hacia la interfase consideran las situaciones que dan lugar a interfases plana, cóncava y convexa.

Se utilizó una viscosidad de $1,5 \times 10^{-3}$ Pa.s típica de un metal puro a la temperatura de fusión como por ejemplo el aluminio. Para la partícula se adoptó una densidad igual a la de la matriz líquida. Las fuerzas de arrastre se calculan a partir del campo de velocidades del fluido alrededor de la partícula, obtenido mediante el modelo resuelto por el método de elementos finitos.

5.3.1 Interfase plana

Se estudió la influencia de los siguientes parámetros: radio de la partícula (R), separación partícula-interfase (h) y velocidad de la interfase (V_{int}).

Los radios de la partícula modelados son: 1 μm , 5 μm , 10 μm , 25 μm y 50 μm .

El rango de la separación h se varía desde una separación mínima de 10^{-8}m (h_{min}) hasta una separación h de equilibrio (h_{eq}).

Para cada separación h se construye una malla diferente. La velocidad de la interfase se calcula considerando que sea menor que la velocidad crítica (V_c), ver Sección 4.2.

En la Figura 5.22 se muestra el resultado del flujo de fluidos para una interfase plana, a una velocidad de $3,3 \times 10^{-8}\text{m/s}$ y las distancias partícula - interfase utilizadas son a) 1×10^{-8} m, b) $6,7 \times 10^{-7}$ m, c) $2,5 \times 10^{-6}\text{m}$ y d) 1×10^{-5} m, donde se puede ver que el flujo alrededor de la partícula es continuo y laminar

y las velocidades más altas se observan en la estrangulación entre la partícula y la interfase.

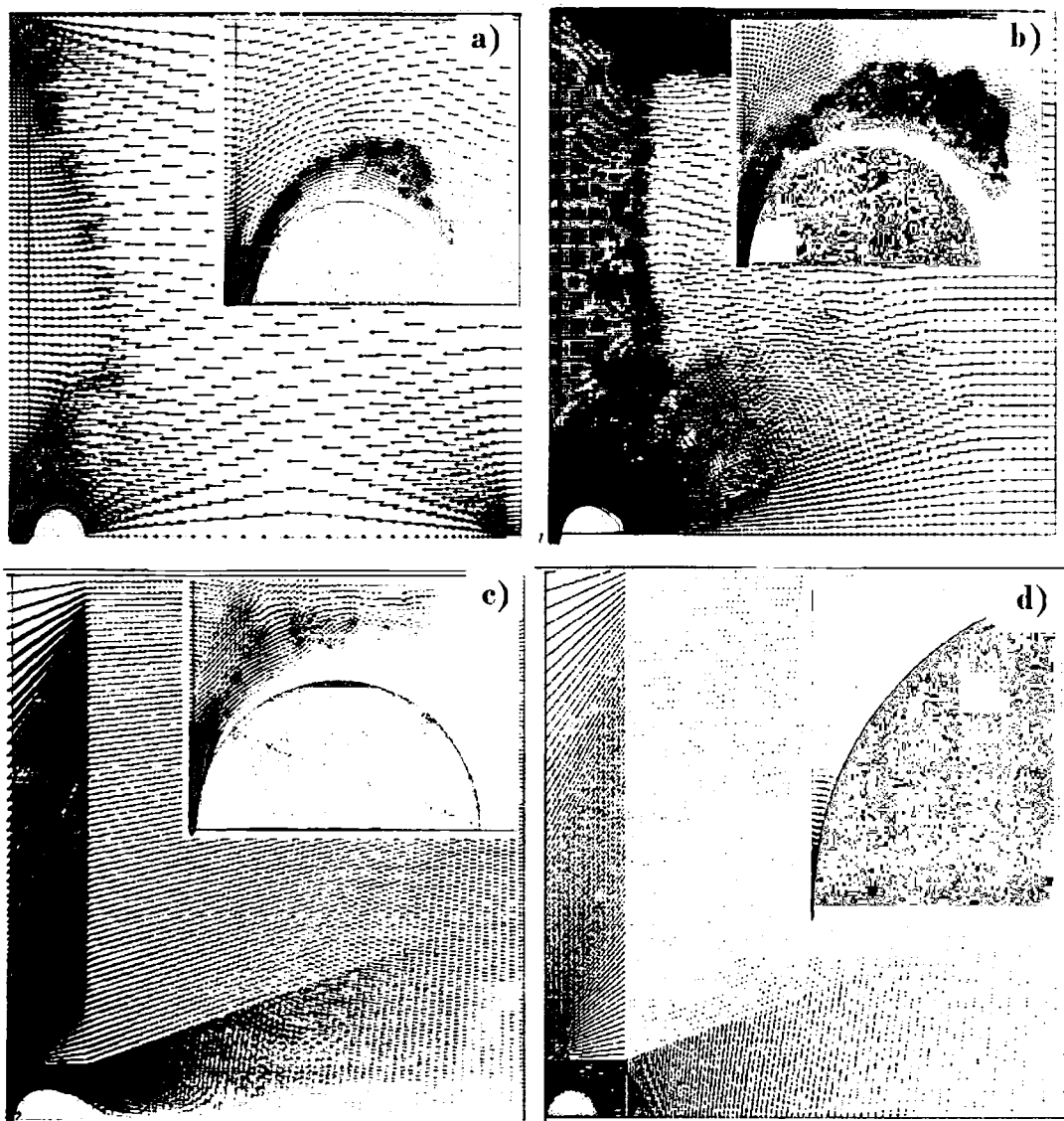


Figura 5.22. Flujo de fluidos alrededor de la partícula para interfaces planas a $V_{int}=3,3 \times 10^{-8} \text{ m/s}$ y las distancias h de a) $1 \times 10^{-5} \text{ m}$, b) $2,5 \times 10^{-6} \text{ m}$, c) $6,7 \times 10^{-7} \text{ m}$ y d) $1 \times 10^{-8} \text{ m}$.

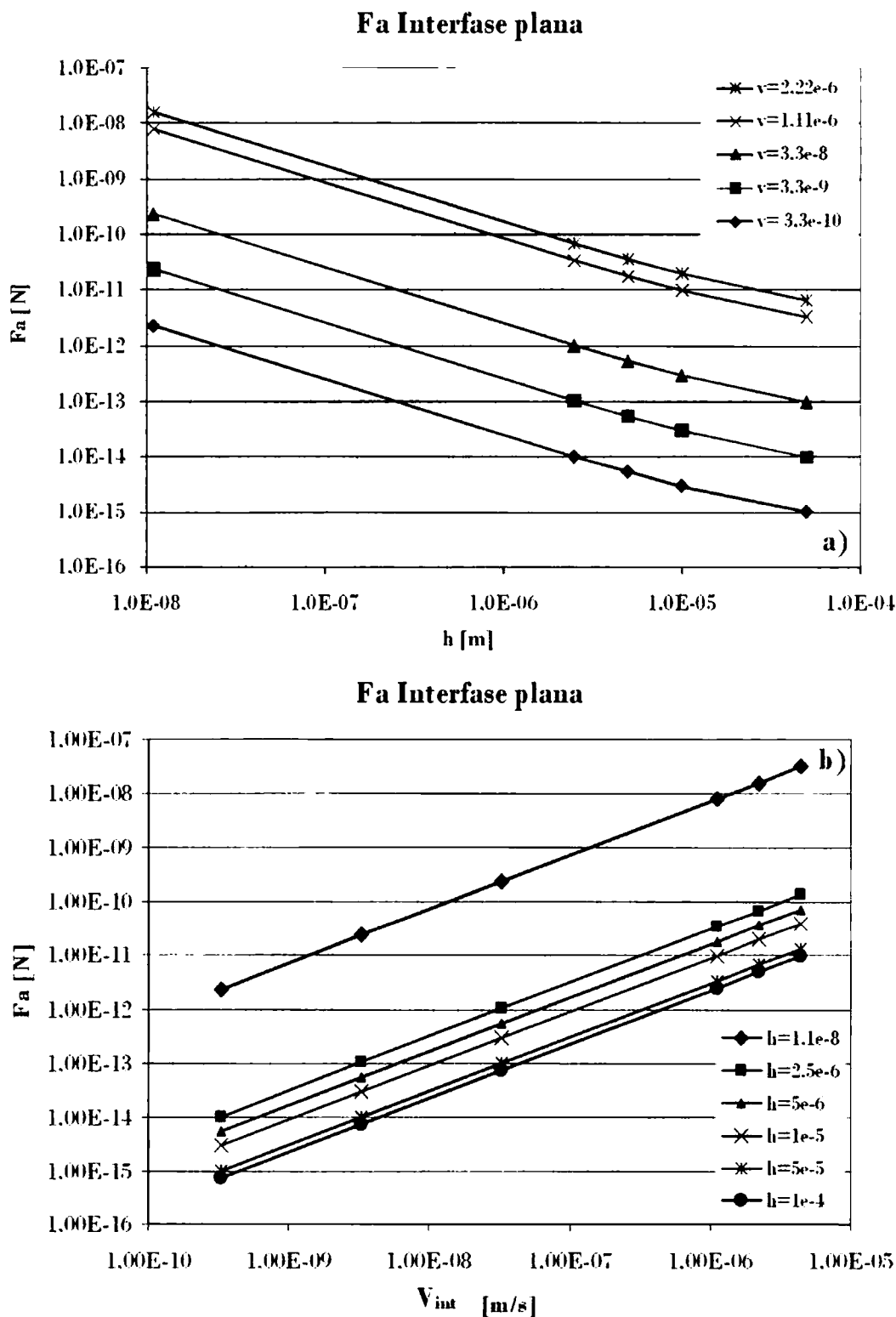
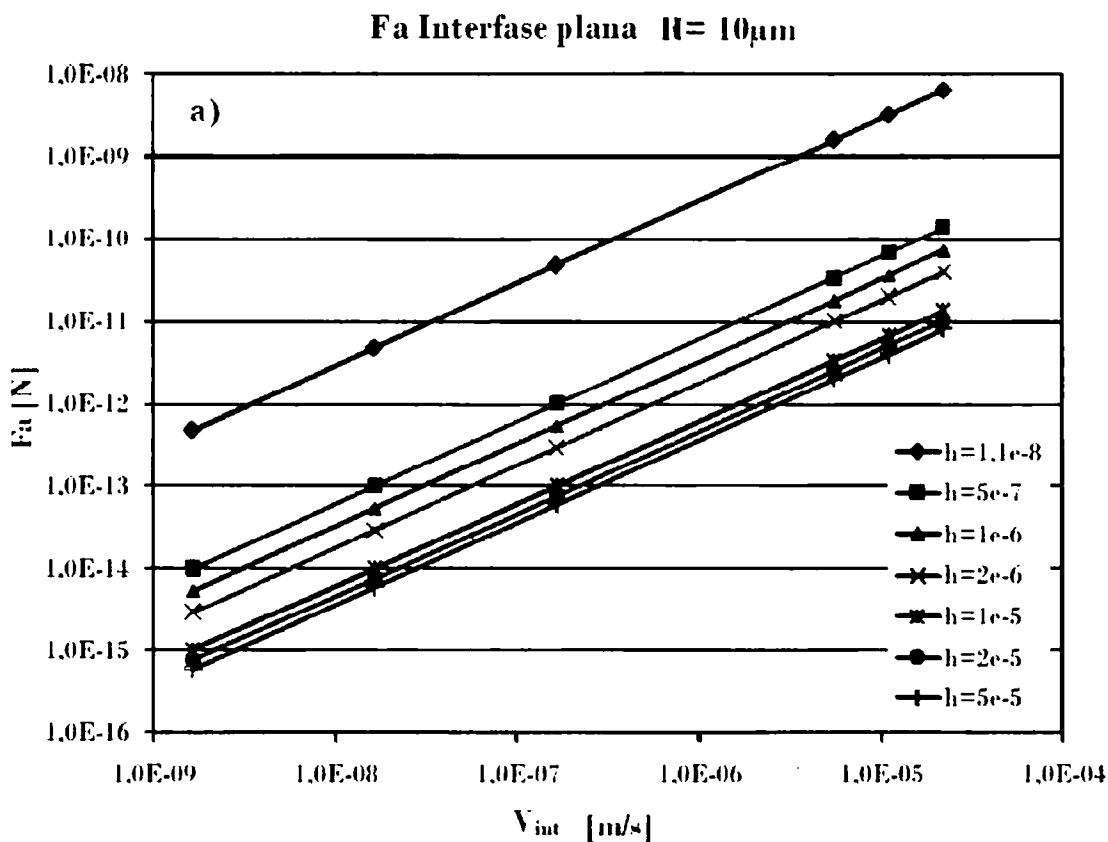


Figura 5.23 Fuerzas de arrastre para partículas de $50\mu\text{m}$ en función de a) la separación h , b) la velocidad.

Las fuerzas de arrastre calculadas para una partícula de $50\mu\text{m}$ se grafican en la Figura 5.23 de dos maneras diferentes: En la Figura 5.23 (a) se

grafican las fuerzas de arrastre en función de la separación h , donde se puede ver que en todos los casos la fuerza de arrastre disminuye cuando h aumenta y en la Figura 5.23 (b) se grafican los resultados en función de la velocidad. Se puede ver que en todos los casos la fuerza de arrastre aumenta cuando la velocidad aumenta.

Por el tipo de funciones es más práctico trabajar con la fuerza versus la velocidad a h constante, y con R constante, ya que como se puede ver en la Figura 5.23 b tienen una relación lineal. Al comparar las fuerzas de arrastre y las fuerzas de repulsión en función de la velocidad resulta más sencillo obtener el punto de equilibrio (h_{eq}) en el cual ambas fuerzas son iguales. Los resultados de las simulaciones para $10\text{ }\mu\text{m}$ se muestran en la Figura 5.24 (a), y los resultados para $1\text{ }\mu\text{m}$ en la Figura 5.24 (b).



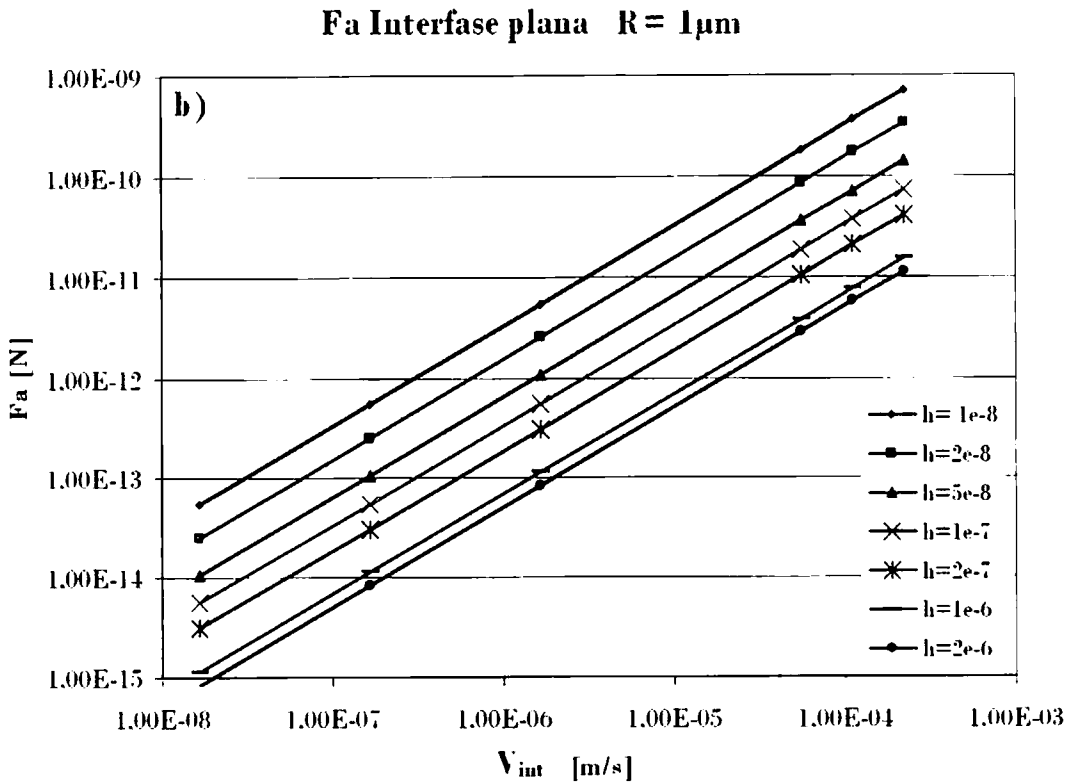


Figura 5.24 Fuerzas de arrastre en función de la velocidad para R de a) $10\mu\text{m}$ b) $1\mu\text{m}$.

De acuerdo a lo mencionado en la Sección 4.3.1 las fuerzas de arrastre se pueden calcular utilizando la ecuación de Stokes Ec.(4.4) y la ecuación de Stokes Modificada para el caso de una interfase plana Ec.(4.5). Los resultados de los cálculos para una partícula de $50\mu\text{m}$ se presentan en los gráficos de las Figuras 5.25 a), b), c) y d).

En la Figura 5.25 a) y b) se representan los valores de las fuerzas de arrastre calculadas utilizando la ecuación de Stokes en función de la velocidad y de separación h , respectivamente. En la Figura 5.25 c) y d) se representan los valores de las fuerzas de arrastre calculadas utilizando la ecuación de Stokes Modificada en función de la velocidad y de la separación h , respectivamente.

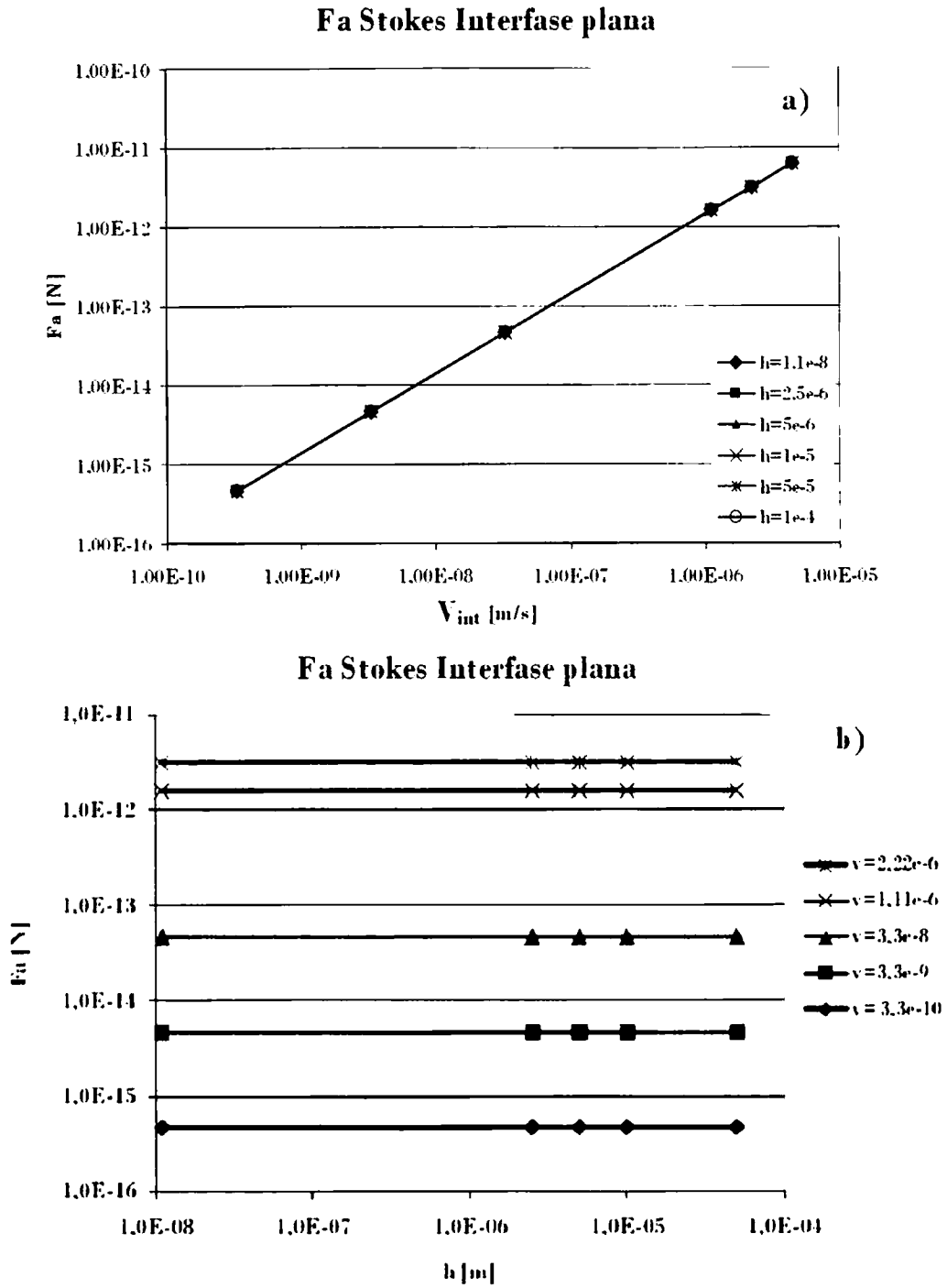


Figura 5.25 Fuerzas de arrastre utilizando la ecuación de Stokes en función de:
a) la velocidad, b) la separación h .

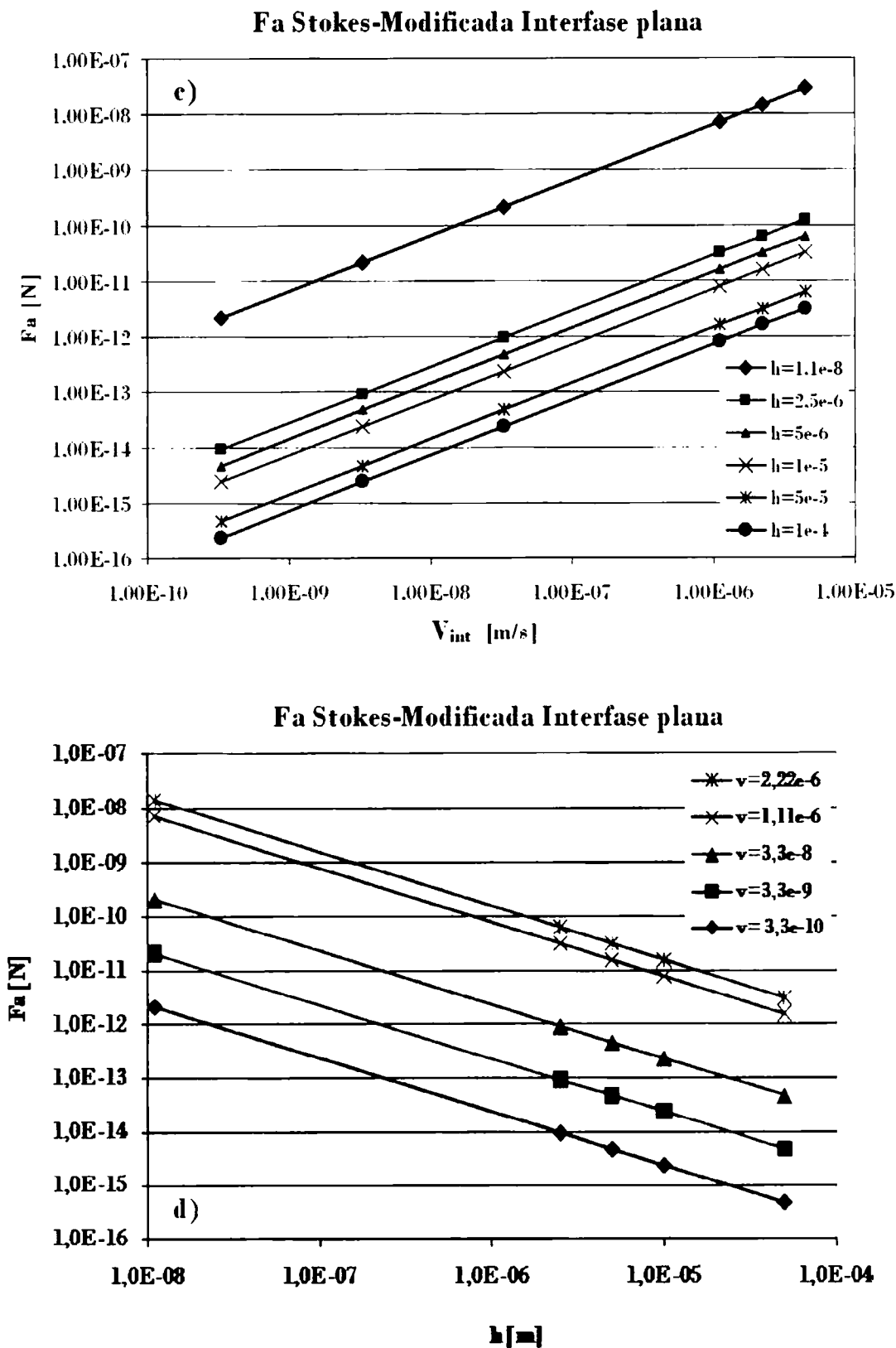


Figura 5.25 Fuerzas de arrastre utilizando la ecuación de Stokes Modificada en función de:
e) la velocidad, d) la separación h .

Los resultados de las fuerzas de arrastre obtenidas con el modelo de

elementos finitos (F_{aSim}) se comparan con las obtenidas de la ley de Stokes ($F_{aStokes}$) y la ecuación de Stokes-Modificada (F_{aS-M}).

Para la comparación se utilizan los valores de las simulaciones para los radios de $1\ \mu\text{m}$, $10\ \mu\text{m}$ y $50\ \mu\text{m}$. Se parametriza la separación h con el radio de partícula R , utilizando para ello la relación $h/2R$. Los valores de $h/2R$ utilizados son $0,0001$; $0,0002$; $0,0005$; $0,01$; $0,025$; $0,05$; $0,5$; 1 y 25 y se calculan las siguientes relaciones F_{aSim}/F_{aS-M} ; $F_{aSim}/F_{aStokes}$; F_{aSim}/F_{aSim} . Los resultados se muestran en las Figura 5.26. Un valor 1 indica una correlación perfecta.

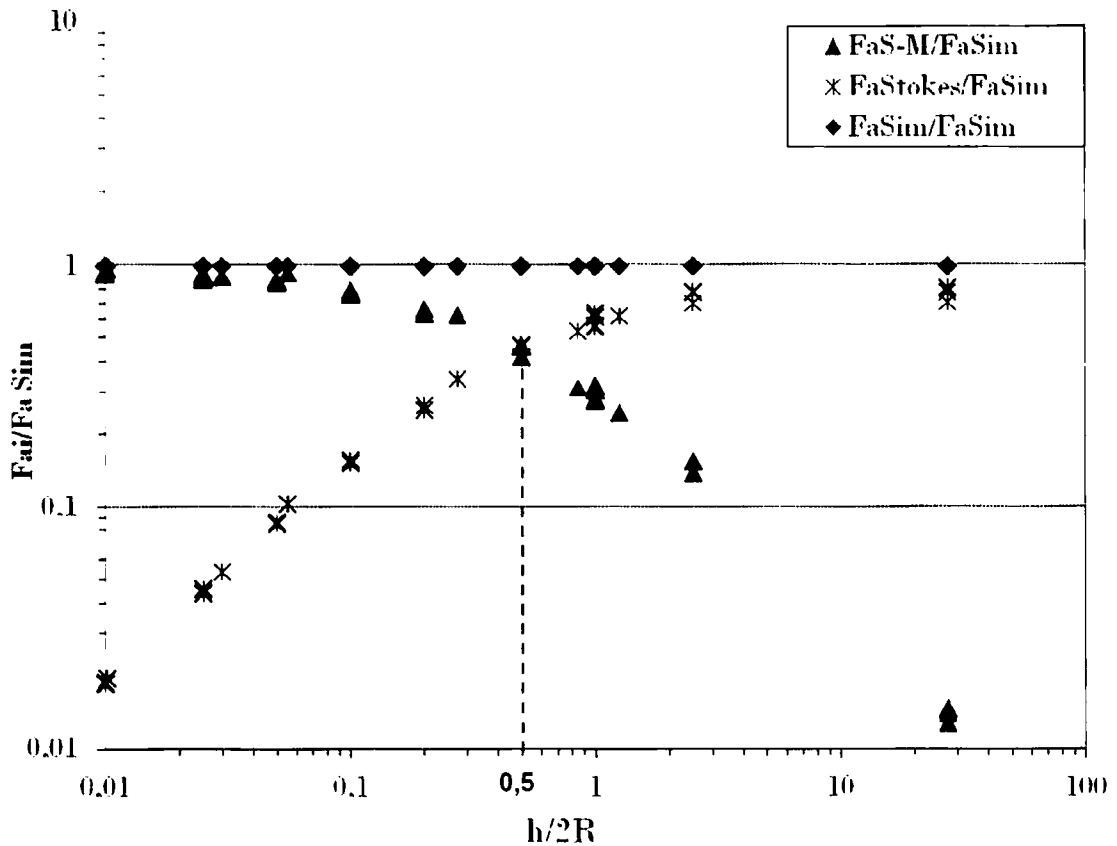


Figura 5.26. Comparación de las fuerzas de arrastre obtenidas a partir de las simulaciones y de modelos analíticos.

Se puede ver que, para valores de $h/2R$ menores que $0,5$; la ecuación de Stokes-Modificada es la que mejor se aproxima a los valores obtenidos para las Fuerzas de arrastre a partir de la simulación y que, para valores de $h/2R$ mayores que $0,5$; la ley de Stokes es la que mejor se adecua a los resultados de

la simulación, en ambos modelos analíticos la mayor desviación se produce a un valor de $h/2R$ de 0,5 y se desvía un valor cercano pero no mayor al 50% del valor calculado por la simulación. De aquí se puede establecer el grado de aproximación de las expresiones analíticas para las fuerzas de arrastre con las soluciones numéricas.

5.3.2 Interfase cóncava

En la Figura 5.27 se muestra el resultado de la simulación del campo de flujo de fluidos para una partícula de $50\text{ }\mu\text{m}$, velocidad de $3,3 \times 10^{-8} \text{m/s}$ a valores de separación h igual a $3,7 \times 10^{-5} \text{m}$; $1,51 \times 10^{-5} \text{m}$; $1 \times 10^{-5} \text{m}$; $2,5 \times 10^{-6} \text{m}$; $1 \times 10^{-6} \text{m}$; $1 \times 10^{-7} \text{m}$. Se observa que el flujo alrededor de la partícula es continuo y laminar. Se puede observar que los mayores valores de velocidad del flujo se encuentran en el canal partícula-interfase. Los valores de Reynolds (Re) en ese canal son menores a 1 como se muestra en la Tabla 5.6, lo que asegura un flujo laminar en el modelo.

Tabla 5.6 Valores de Re en el canal partícula-interfase.

R [m]	h [m]	V_{canal} [m/s]	Re
5,00E-05	1,82E-08	8,63E-04	1,55E-01
5,00E-05	1,01E-06	1,07E-05	1,92E-03
5,00E-05	3,70E-05	1,28E-06	2,30E-04
1,00E-05	1,32E-08	4,80E-04	1,73E-02
1,00E-05	2,02E-07	1,07E-04	3,85E-03
1,00E-05	3,03E-06	1,80E-05	6,46E-04
1,00E-06	2,02E-08	2,14E-03	7,70E-03
1,00E-06	3,03E-07	1,79E-04	6,45E-04

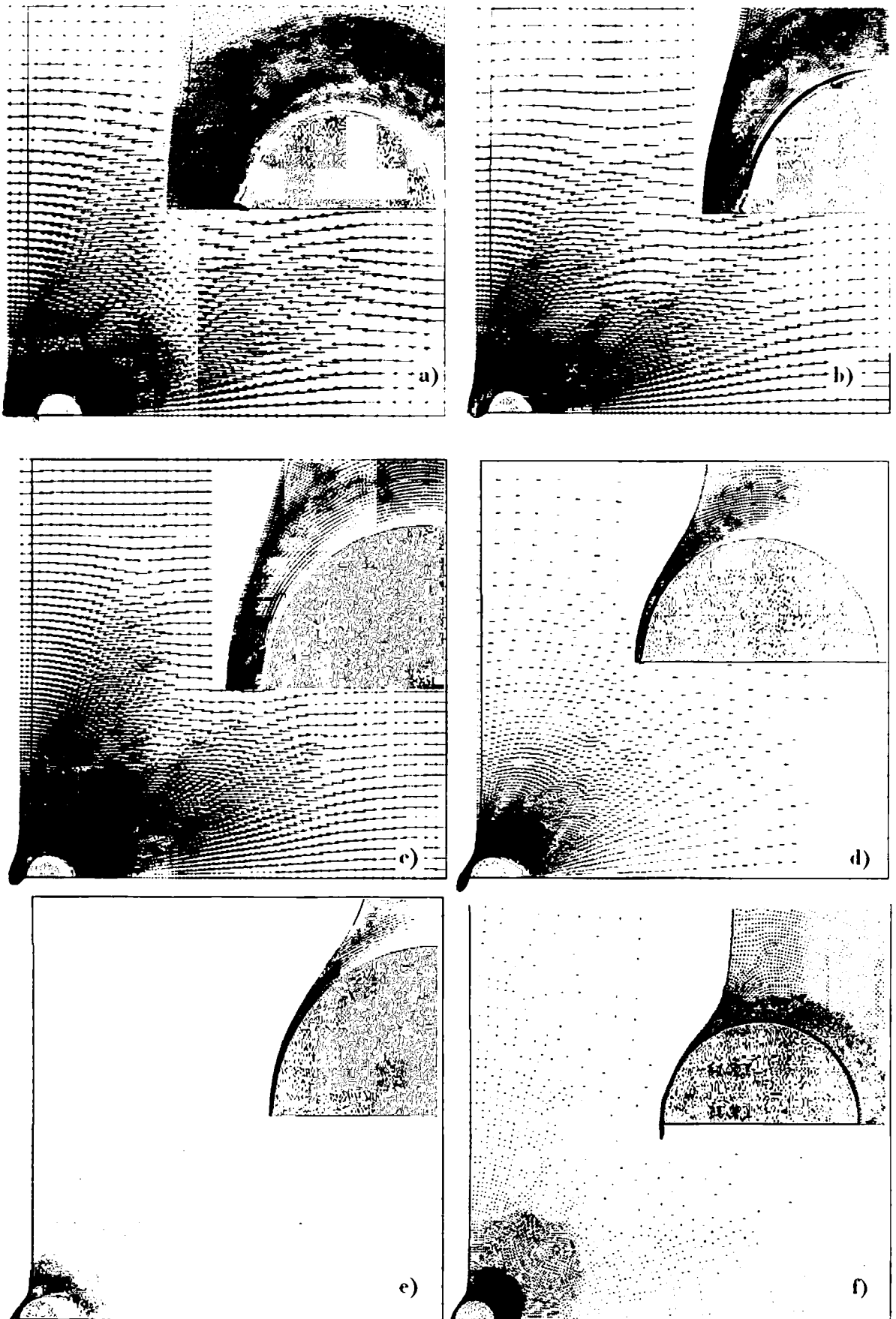
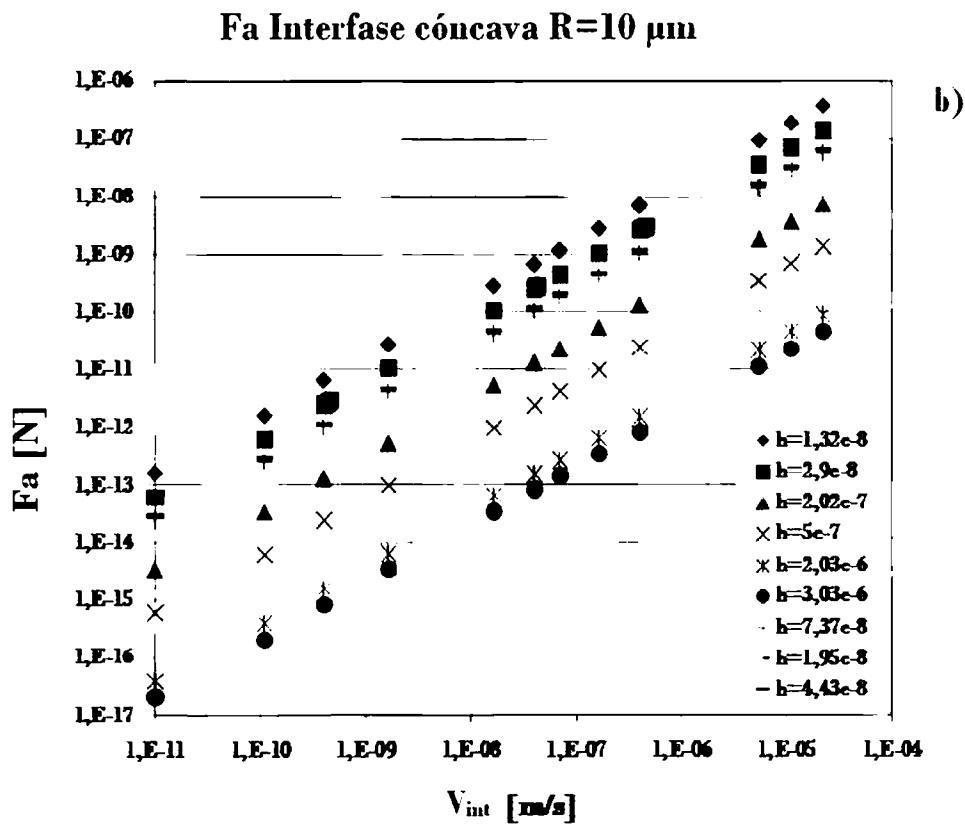
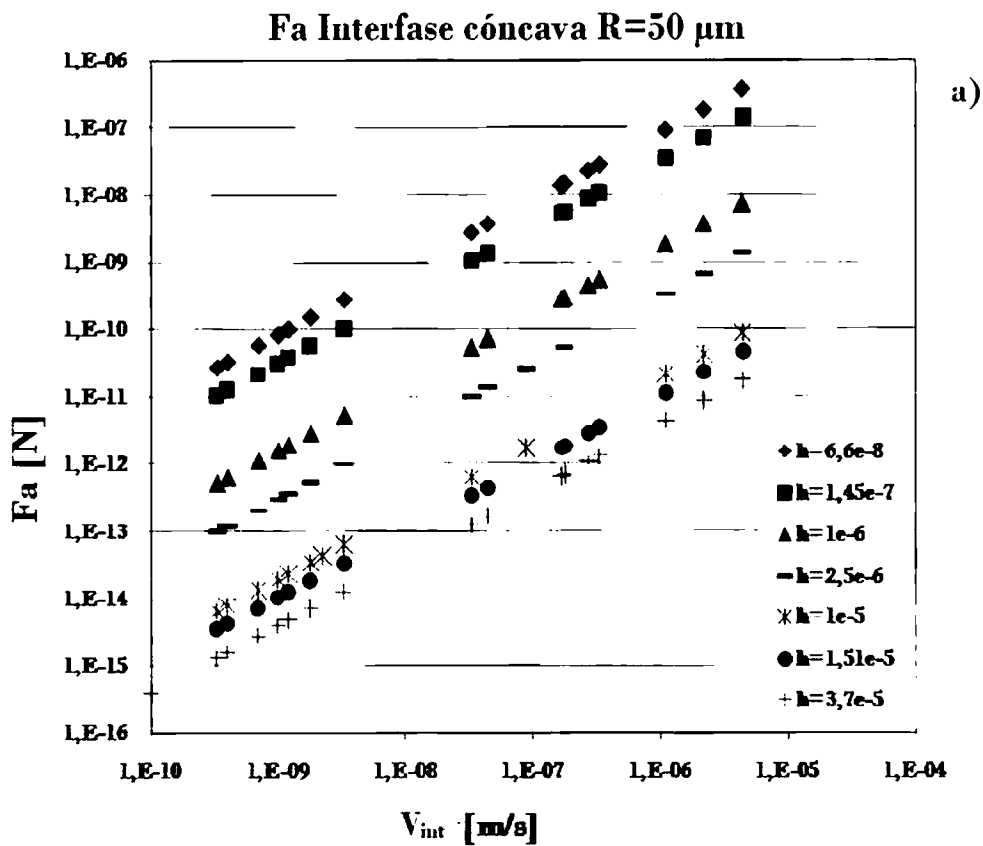


Figura 5.27 Flujo de fluidos alrededor de la partícula de $R = 50 \mu\text{m}$ para interfaces cóncavas a $V_m = 3.3 \times 10^{-3} \text{ m/s}$ y distancias h de:

a) $3.7 \times 10^{-5} \text{ m}$, b) $1.51 \times 10^{-5} \text{ m}$, c) $1 \times 10^{-5} \text{ m}$, d) $2.5 \times 10^{-6} \text{ m}$, e) $1 \times 10^{-6} \text{ m}$ y f) $1 \times 10^{-3} \text{ m}$.



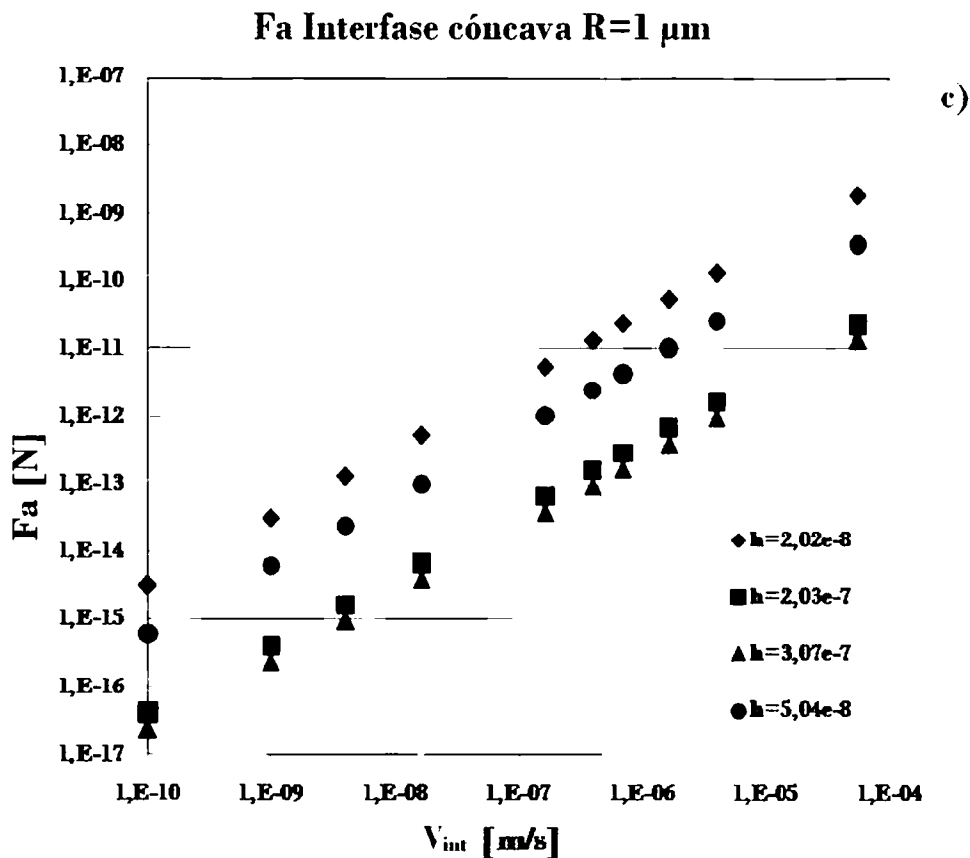


Figura 5.28 Fuerzas de arrastre en función de la velocidad para interfases cóncavas y tres R de partícula a) 50 μm . b) 10 μm y c) 1 μm .

El rango de velocidades impuesto en la simulación varió entre 1×10^{-11} m/s y 1×10^{-4} m/s, el mismo abarca un amplio rango comprendiendo los observados normalmente en la solidificación de metales [1-2] y donde se podría encontrar una partícula en estado estacionario de repulsión. El valor de F_a es calculado para cada velocidad, tamaño de partícula y configuración geométrica interfase-partícula. En la Figura 5.28 se grafican los resultados de las fuerzas de arrastre en función de la velocidad para los tres radios de partícula de 1 μm , 10 μm y 50 μm simuladas a cada separación de h . Se puede ver que en todos los casos la fuerza de arrastre aumenta cuando la velocidad aumenta.

5.3.3 Interfase convexa

Los resultados de la simulación del flujo de fluidos para una partícula de radio igual a $50\text{ }\mu\text{m}$ con una interfase convexa, velocidad de $3,3 \times 10^{-8}\text{m/s}$ y valores de separación h igual a $1,1 \times 10^{-5}\text{m}$; $1,16 \times 10^{-6}\text{m}$; $2,4 \times 10^{-7}\text{m}$; $4,1 \times 10^{-7}\text{m}$; $2,7 \times 10^{-7}\text{m}$; $1,82 \times 10^{-8}\text{m}$ se muestran en la Figura 5.29, donde se observa que el flujo alrededor de la partícula es continuo y laminar, las velocidades más altas se observan en la estrangulación entre la partícula y la interfase. Los valores de Re en ese canal son menores a 1 como se muestra en la Tabla 5.7, lo que asegura un flujo laminar en el modelo.

Tabla 5.7 Valores de Re en el canal partícula-interfase.

R [m]	h [m]	V_{canal} [m/s]	Re
5,00E-05	1,28E-05	1,18E-05	2,12E-03
5,00E-05	1,17E-06	1,65E-05	2,97E-03
5,00E-05	1,82E-08	1,05E-04	1,89E-02
1,00E-05	3,03E-06	1,16E-05	4,19E-04
1,00E-05	2,90E-07	1,50E-05	5,39E-04
1,00E-05	1,94E-08	9,64E-05	3,47E-03
1,00E-06	9,48E-08	1,26E-05	4,53E-05
1,00E-06	2,90E-08	2,36E-05	8,48E-05
1,00E-06	1,00E-08	1,99E-05	7,17E-05

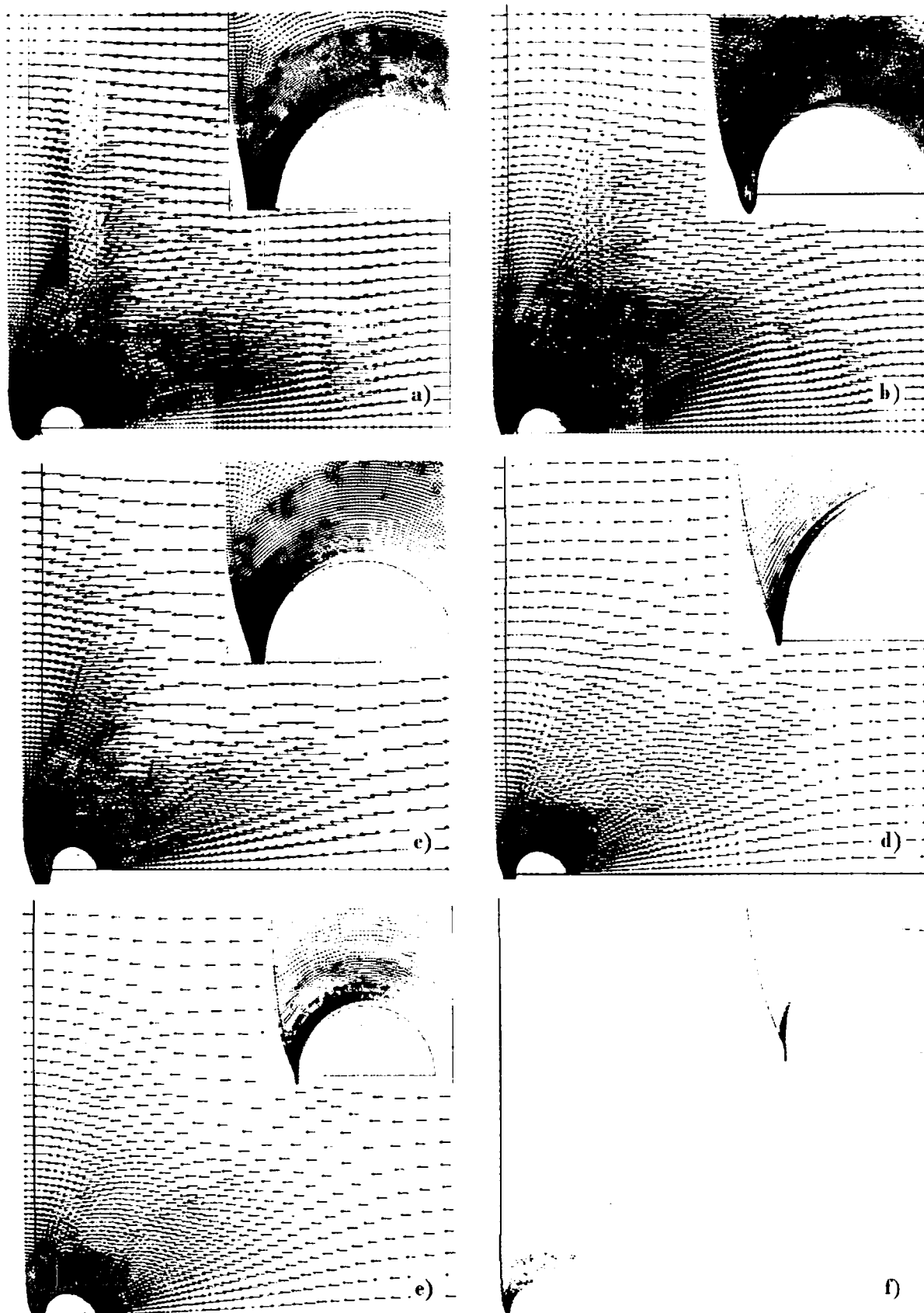
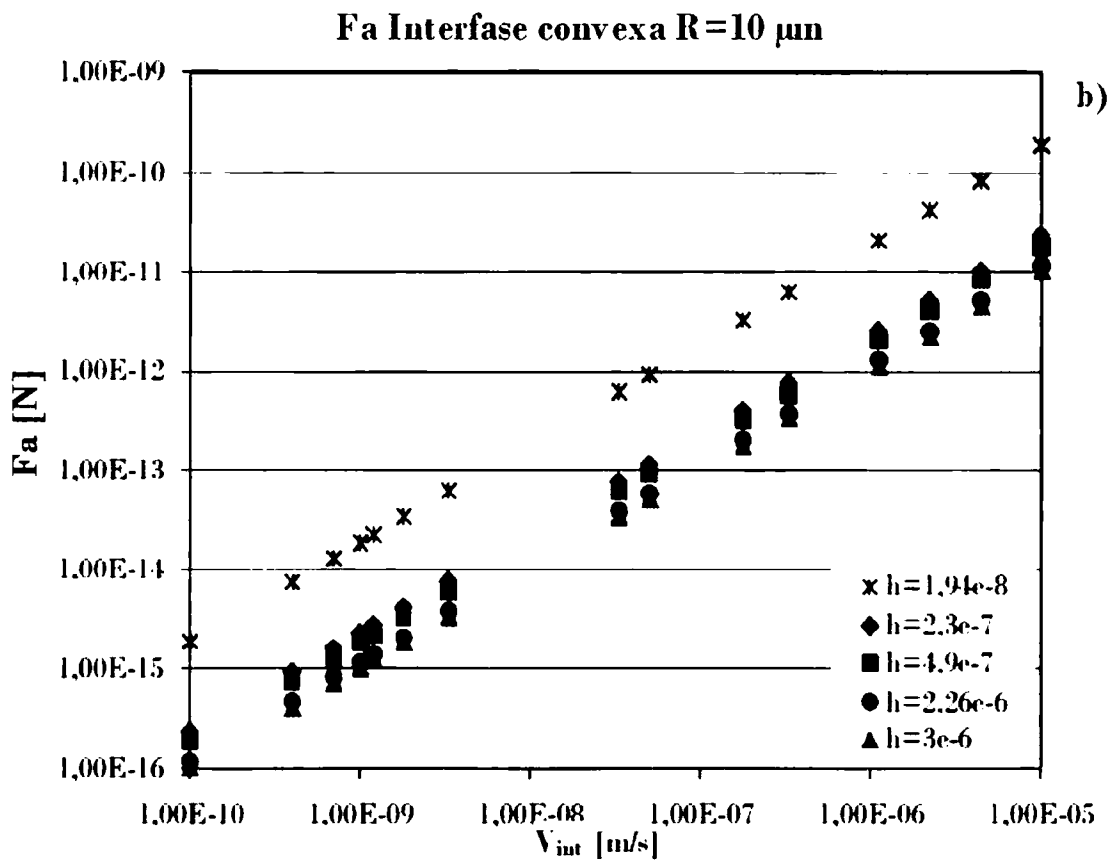
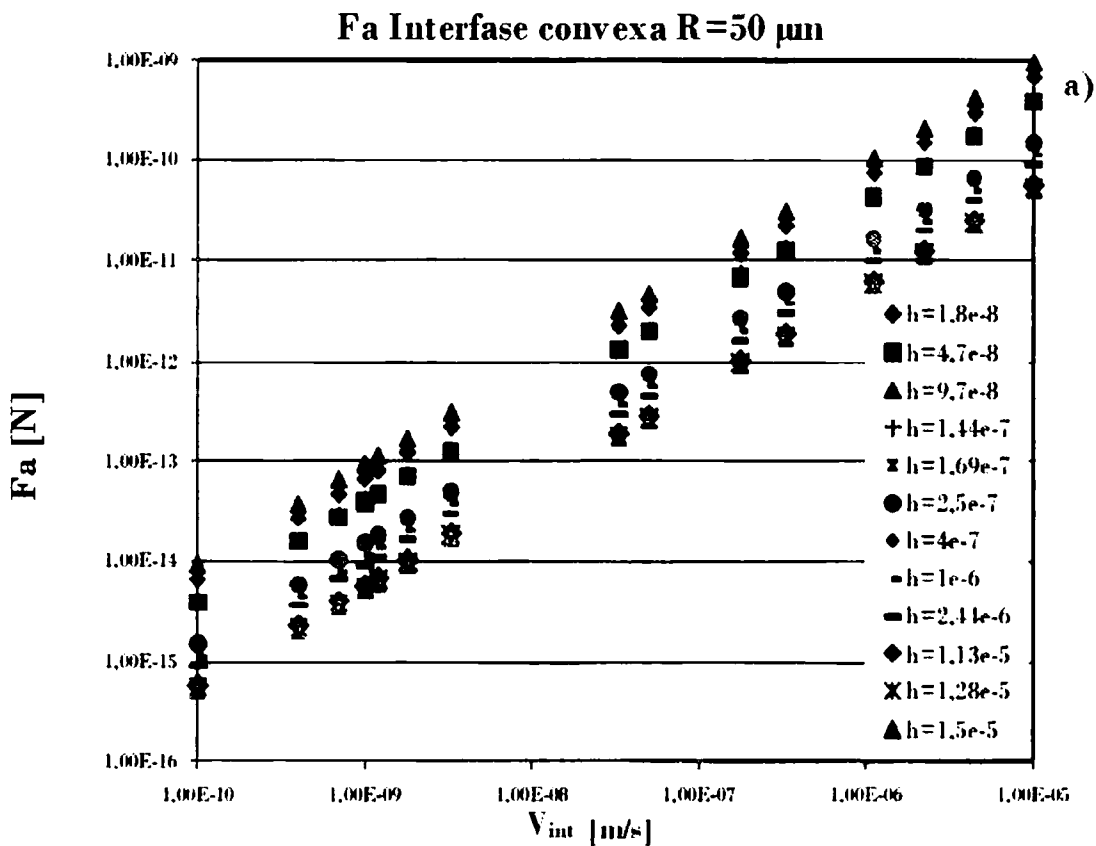


Figura 5.29 Flujo de fluidos alrededor de la partícula de $R = 50 \mu\text{m}$ para interfaces convexas a $V_{\text{int}} = 3,3 \times 10^{-8} \text{ m/s}$ y distancias h de:
a) $1,1 \times 10^{-5} \text{ m}$, b) $1,16 \times 10^{-6} \text{ m}$, c) $2,4 \times 10^{-6} \text{ m}$, d) $4,1 \times 10^{-7} \text{ m}$, e) $2,7 \times 10^{-7} \text{ m}$ y f) $1,82 \times 10^{-8} \text{ m}$.



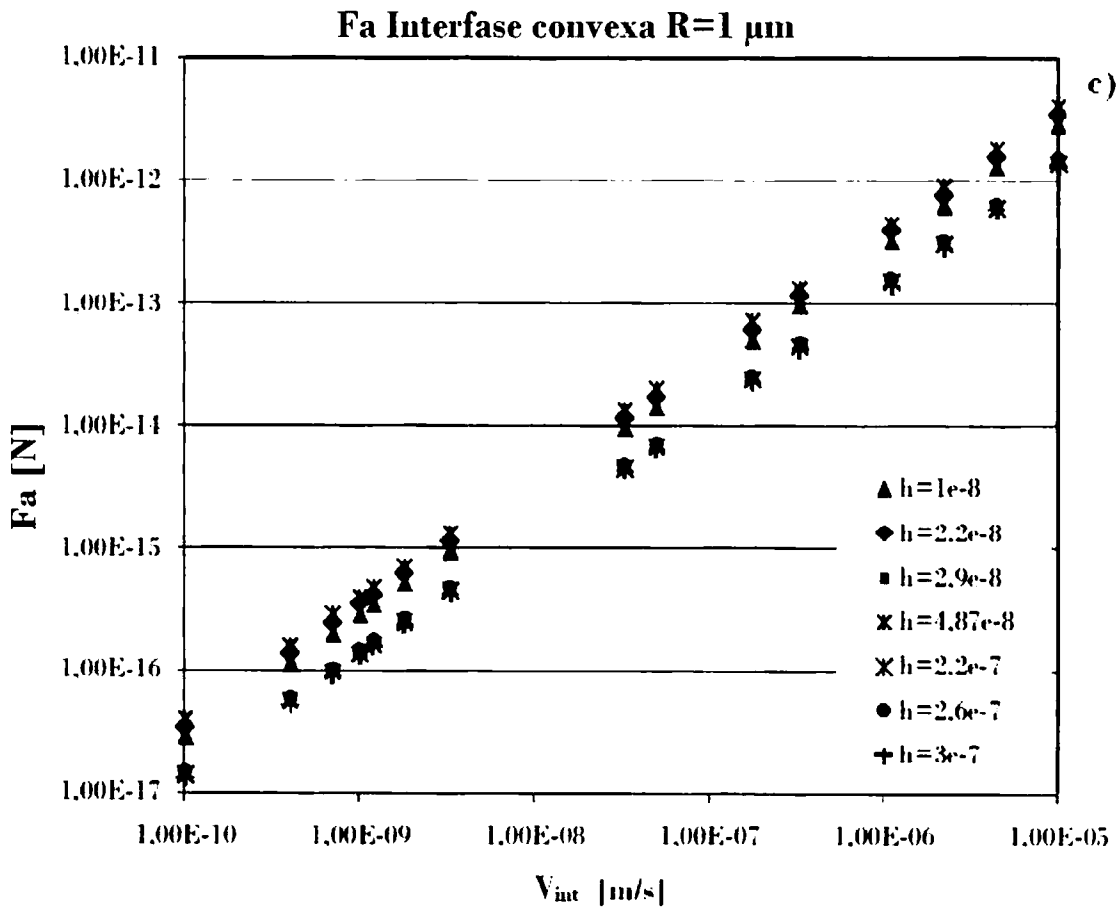


Figura 5.30 Fuerzas de arrastre en función de la velocidad para interfases convexas y tres R de partícula a) 50 μm , b) 10 μm y c) 1 μm .

El rango de velocidades impuesto en la simulación varió entre 1×10^{-10} m/s y 1×10^{-5} m/s, el mismo abarca un amplio rango comprendiendo los observados normalmente en la solidificación de metales [6-7] y donde se podría encontrar una partícula en estado estacionario de repulsión. El valor de Fa es calculado para cada velocidad, tamaño de partícula y configuración geométrica interfase-partícula. En la Figura 5.30 a se grafican los resultados de las fuerzas de arrastre en función de la velocidad para tres tamaños de partícula de 1 μm , 10 μm y 50 μm simuladas a cada separación h . Se puede ver que en todos los casos la fuerza de arrastre aumenta cuando la velocidad aumenta.

5.3.4 Comparación entre los resultados de las fuerzas de arrastre obtenidas para las interfases plana, cóncava y convexa

En la Figura 5.31 se muestra un resultado típico del flujo de fluidos para una interfase cóncava y una plana. Una diferencia entre los flujos de las

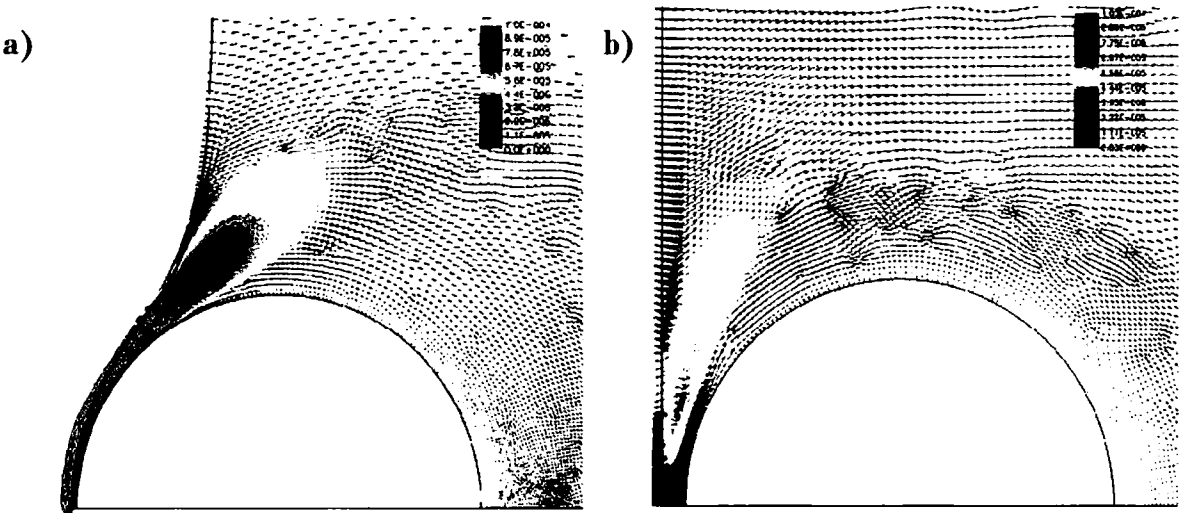


Figura 5.31. Flujo de fluidos alrededor de la partícula, (a) interfase cóncava, (b) interfase plana.

interfases cóncava y plana se observa en la distribución de velocidades, cuando la interfase es cóncava se puede observar que los mayores valores de velocidad del flujo se encuentran cercanos al centro del canal partícula-interfase.

Los valores de Fa en función de la separación h , a una misma velocidad, en un gráfico log-log se muestran en la Figura 5.32, se observa que cuando la interfase es cóncava, la fuerza de arrastre es mayor en al menos un orden de magnitud que el correspondiente a una interfase plana a un mismo h . Se puede observar también que cuando la interfase es plana existe una relación lineal entre $\log (Fa)$ y $\log (h)$.

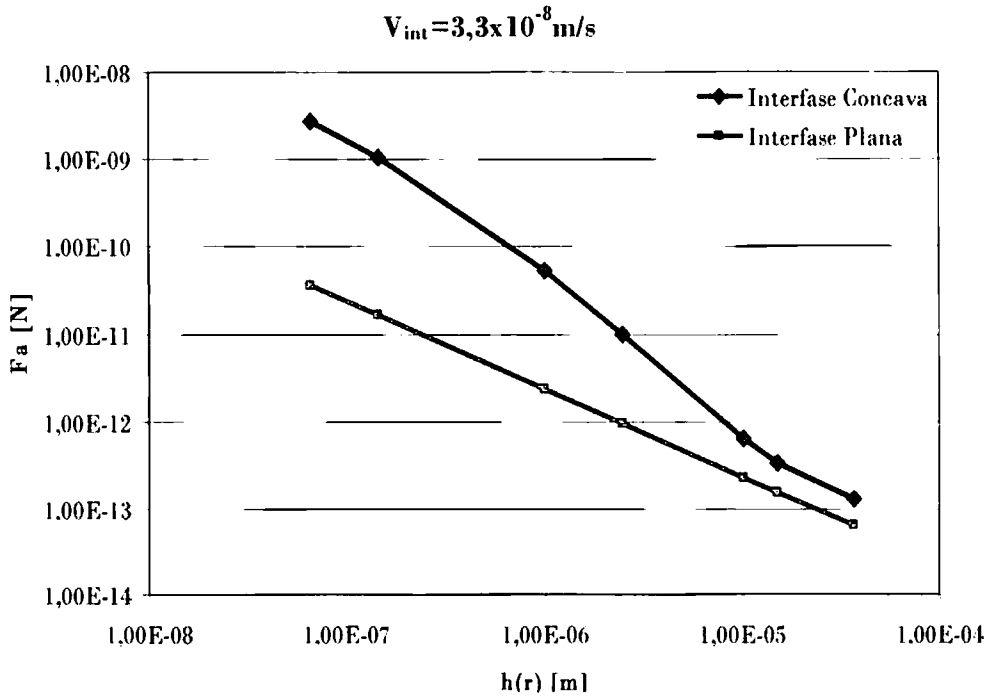


Figura 5.32. Fuerzas de arrastre en función de la separación partícula-interfase para interfases planas y cóncavas.

En la Figura 5.33 se muestra el flujo de fluidos alrededor de la partícula y en el canal partícula-interfase; en la Figura 5.33a para un interfase plana y en la Figura 5.33b para una interfase convexa. En cada caso se observa un campo de flujo de fluidos semejante con la diferencia de que los mayores valores de la velocidad del flujo se encuentran cercanos al centro del canal en la interfase convexa.

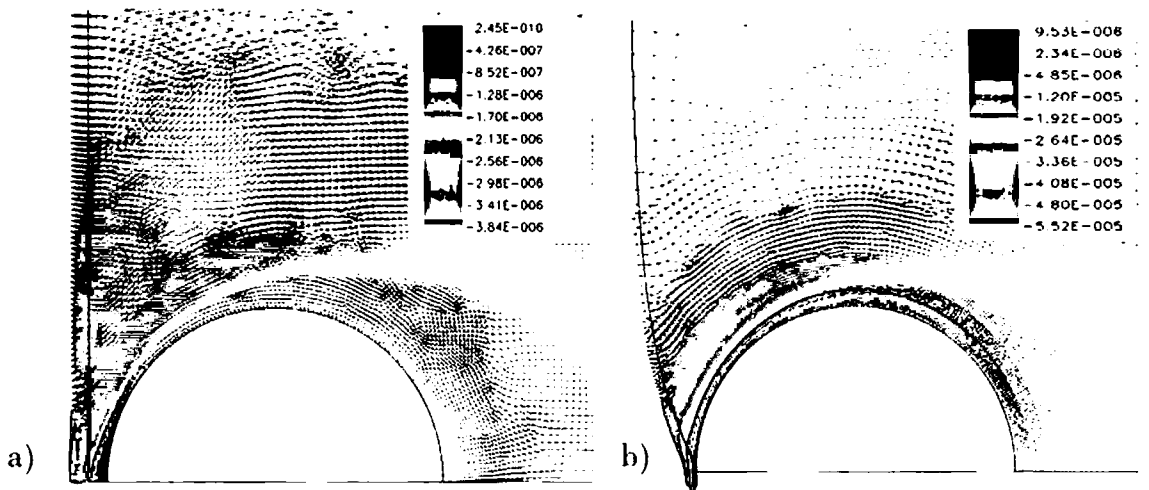


Figura 5.33. Flujo de fluidos alrededor de la partícula. (a) interfase plana, (b) interfase convexa.

Graficando los valores de Fa en función de h a una misma velocidad, ver Figura 5.34, se observa que cuando la interfase es convexa, la fuerza de arrastre es menor en al menos un orden de magnitud que el correspondiente a una interfase plana, a un mismo h .

Se puede concluir entonces que las Fa para las interfases cóncavas son mayores que para las interfases planas y las Fa para interfases convexas son menores que para las interfases planas, esto es:

$$Fa \text{ Cóncava} > Fa \text{ Plana} > Fa \text{ Convexa}$$

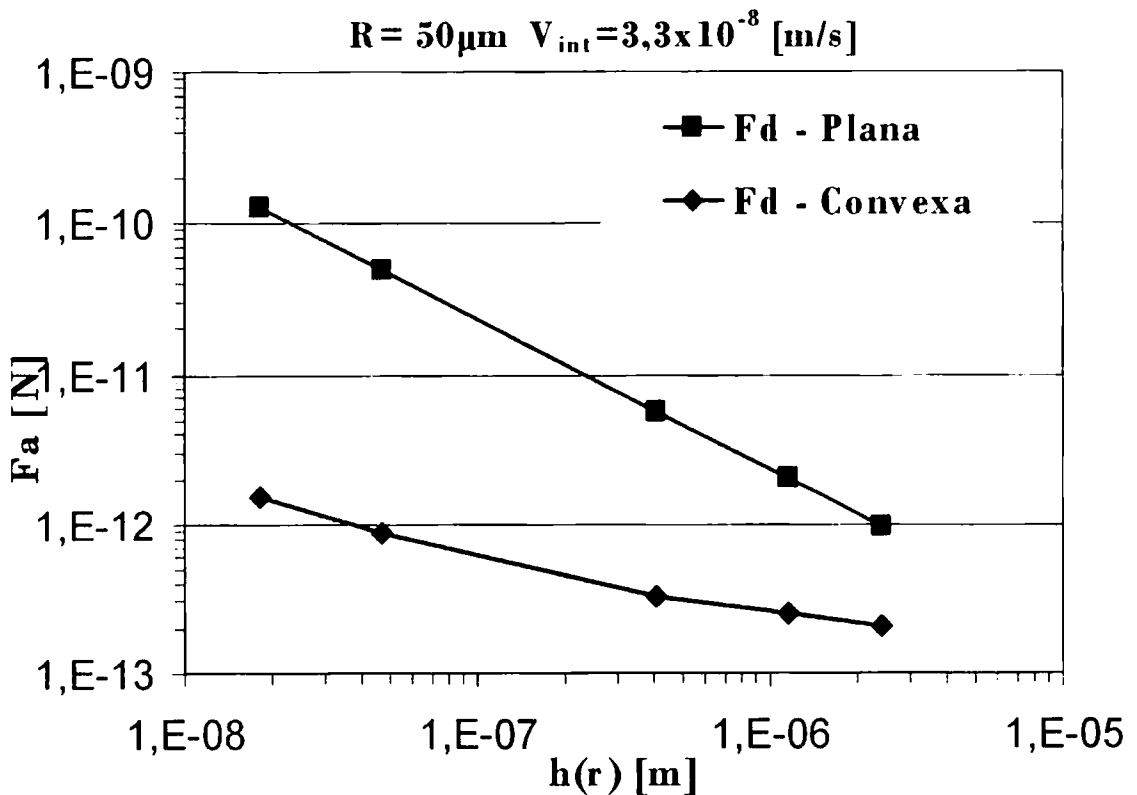


Figura 5.34. Fuerzas de arrastre para interfases planas y convexas.

En un gráfico log log, se puede observar que las Fa para las interfases planas son lineales. En cambio no son lineales para las interfases cóncavas ni para las convexas.

5.4 Modelo de fuerzas de repulsión

Los resultados de las fuerzas de repulsión se calculan utilizando la ecuación de Casimir-Lifshitz-van der Waals (Ec. 4.6), Capítulo 4.3.2.

$$F_r = 2\pi B_3 \int_0^R \frac{r dr}{h^3(r)} \quad (4.6)$$

Para resolver la ecuación se debe incorporar una función que describa la separación entre interfase y partícula en función de la distancia r , donde r es la distancia desde el eje perpendicular a la interfase sólido-líquida hasta la interfase sólido-líquida como se muestra en la Figura 2.3 del Capítulo 2 y $h(r)$ es la separación entre la interfase y la partícula, ver figura, 5.36. Esta función discreta se obtuvo a partir de los resultados de la simulación del modelo térmico. Por lo tanto, esta integral es factible de ser resuelta empleando técnicas de integración numérica. Esta ecuación se resolvió por métodos numéricos de integración, específicamente se emplearon el método del trapecio estándar y el método del trapecio adaptativo. Los resultados mostraron diferencias del orden del 5% entre ambos métodos; por lo que se resolvió adoptar el método más simple para el trabajo, que es el método del trapecio.

5.4.1 Interfase plana

En el caso de la interfase plana, las fuerzas de repulsión se calculan utilizando la Ec. 4.7. Los resultados de los cálculos para las partículas de 1 μm , 10 μm y 50 μm . se muestran en la Figura 5.35.

Se puede observar que la fuerza de repulsión aumenta cuando la distancia partícula-interfase disminuye.

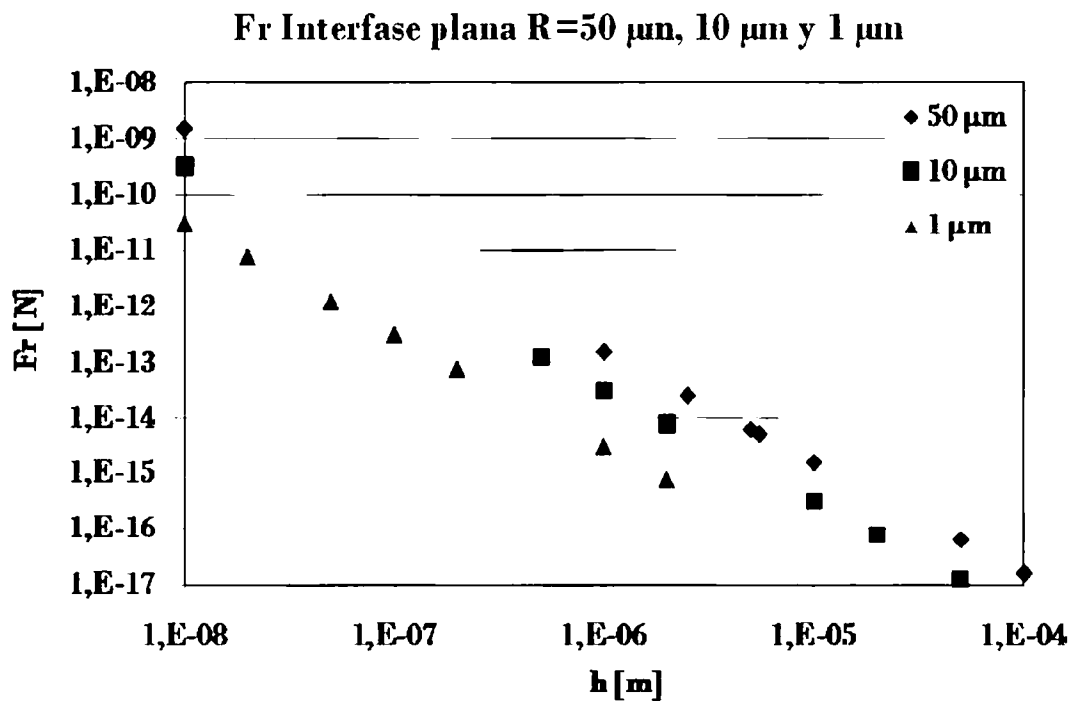


Figura 5.35 Fuerzas de repulsión en función de la separación h para interfases planas y R= 1 μm , 10 μm y 50 μm .

5.4.2 Interfase cóncava

Para resolver la integral se calculan las coordenadas como se indica en la Figura 5.36. A cada valor de separación h se registra la forma de la interfase a partir del modelo térmico, ver Capítulo 5.2.3.

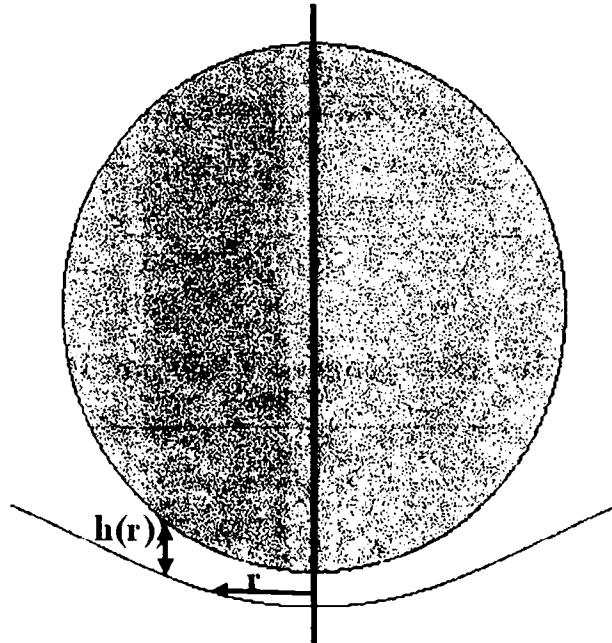


Figura 5.36 Esquema del sistema partícula-interfase.

En la Figura 5.37 se muestra la partícula de $50\ \mu\text{m}$ y el dibujo de la interfase a un $h=2,5 \times 10^{-6}\text{m}$.

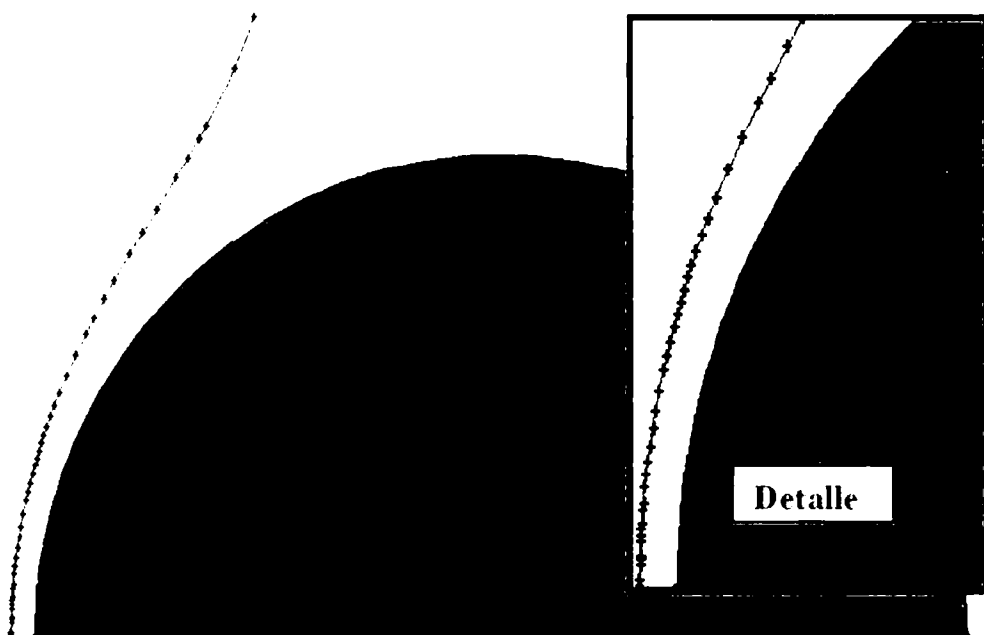


Figura 5.37 Dibujo de la interfase cóncava a una separación $h=2,5 \times 10^{-6}\text{m}$

Sobre la interfase están marcados los nodos a partir de los cuales se obtienen las coordenadas que se utilizan para resolver la integral.

Este procedimiento se realiza para obtener las coordenadas en cada tamaño de la partícula y a cada valor de h . Los resultados de los cálculos se muestran en la Figura 5.38, en donde se señala en rojo el resultado que corresponde a la fuerza de repulsión calculada a partir de la Figura 5.37 correspondiente a una separación $h=2,5\times10^{-6}\text{m}$. Se puede observar en todos los casos que la fuerza de repulsión aumenta cuando la distancia partícula-interfase disminuye.

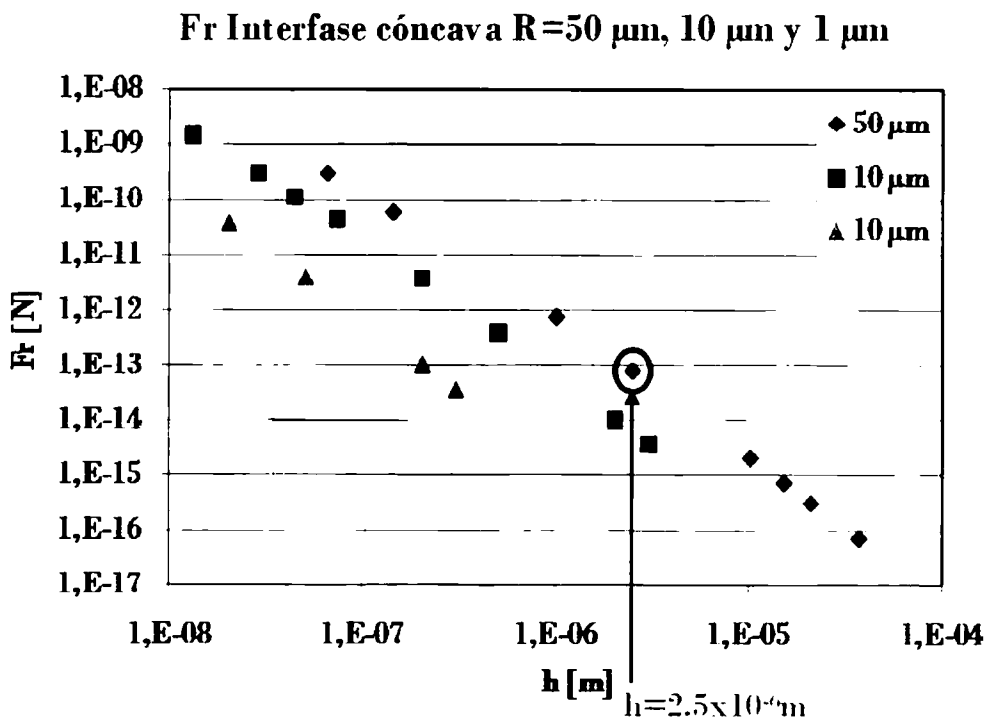


Figura 5.38 Fuerza de repulsión en función de la separación h para interfases cóncavas y $R=1\text{ }\mu\text{m}$, $10\text{ }\mu\text{m}$ y $50\text{ }\mu\text{m}$.

5.4.3 Interfase convexa

Las fuerzas de repulsión en el caso de las interfases convexas se calculan de igual manera que para las interfases cóncavas al resolver la ecuación 4.6.

En la Figura 5.39 se muestra la partícula de $50\ \mu\text{m}$ y el dibujo de la interfase convexa a un $h=2,4\times 10^{-6}\text{m}$. Sobre la interfase están marcados los nodos a partir de los cuales se obtienen las coordenadas que se utilizan para resolver la integral.

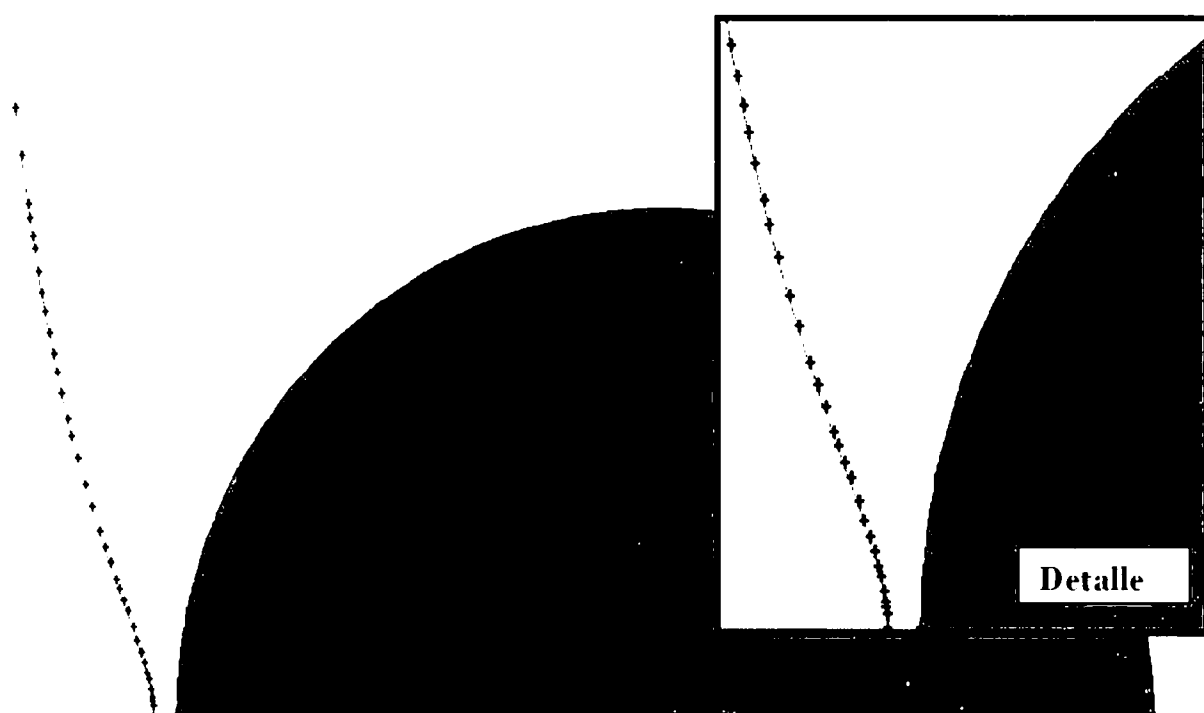


Figura 5.39 Dibujo de la interfase convexa a una separación $h=2,4\times 10^{-6}\text{m}$

Para cada tamaño de partícula y cada distancia de h , se realiza este procedimiento. Los resultados de los cálculos se muestran en la Figura 5.40, en donde se señala en rojo el resultado que corresponde a la fuerza de repulsión calculada a partir de la Figura 5.39 correspondiente a una separación $h=2,4\times 10^{-6}\text{m}$. Se puede observar en todos los casos que la fuerza de repulsión aumenta cuando la distancia partícula-interfase disminuye.

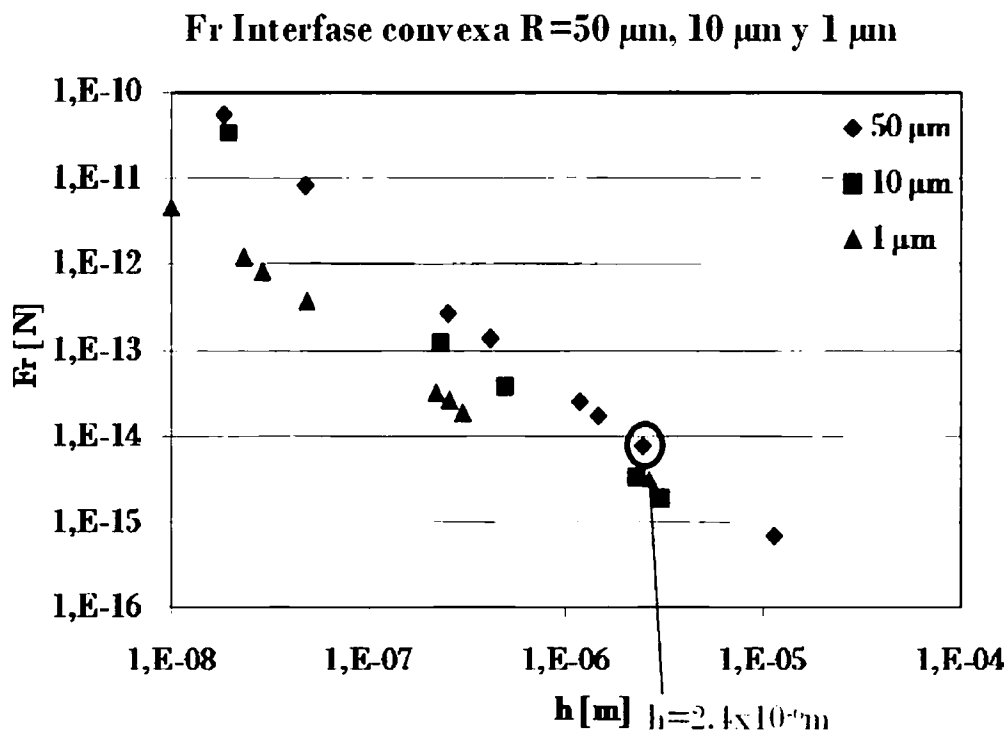


Figura 5.40 Fuerza de repulsión en función de la separación h para interfaces convexas y $R = 1 \mu m, 10 \mu m$ y $50 \mu m$.

5.4.4 Comparación entre interfaces cóncava, plana y convexa

Se realiza una comparación entre los resultados obtenidos de las fuerzas de repulsión. En la Figura 5.41 se comparan los resultados entre una interfase cóncava y una plana para una partícula de $50 \mu m$. Se puede observar que la fuerza de repulsión para una interfase cóncava es mayor que la correspondiente a una interfase plana cuando la separación h es menor que $2 \times 10^{-5} m$.

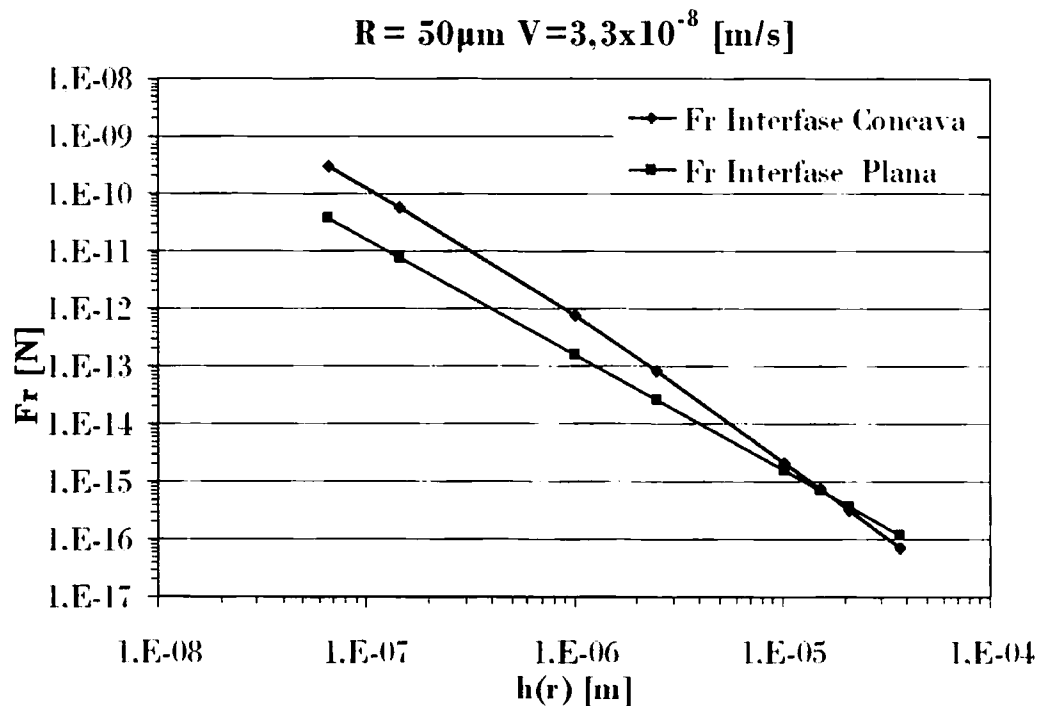


Figura 5.41. Fuerzas de repulsión en función de la separación partícula-interfase para interfases planas y cóncavas.

Este resultado concuerda con lo esperado, ya que la curvatura de la interfase al aproximarse a la partícula la rodea ocasionando mayor interacción, y por lo tanto mayor repulsión.

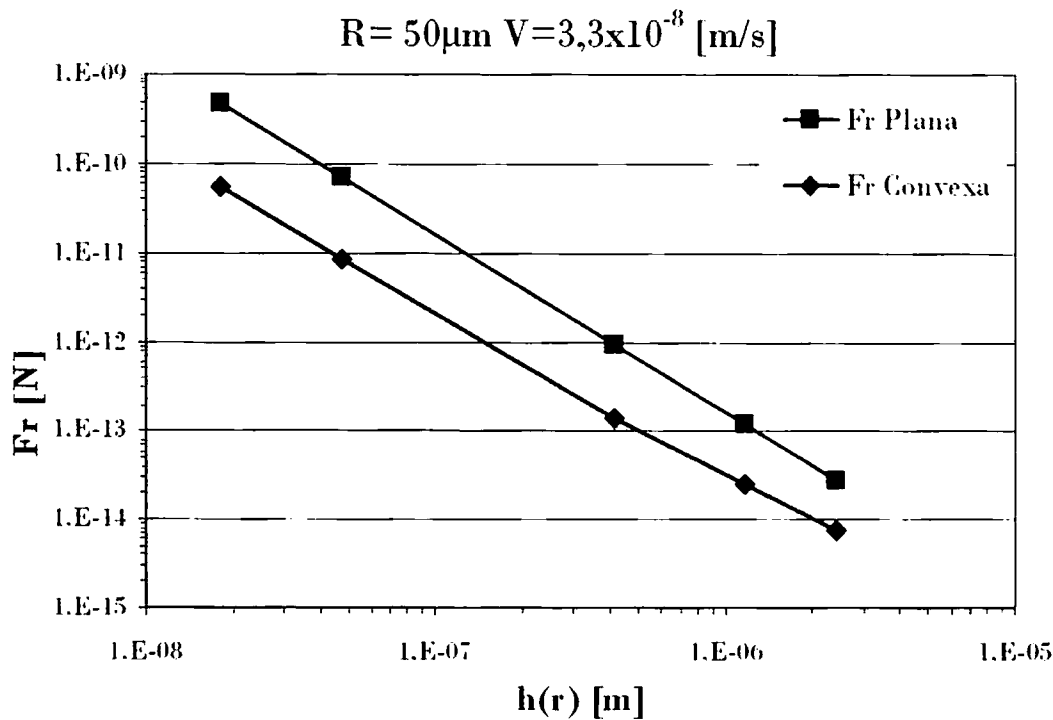


Figura 5.42. Fuerzas de repulsión en función de la separación partícula-interfase para interfases planas y convexas.

En la Figura 5.42 se comparan los resultados entre una interfase convexa y una interfase plana para una partícula de $50\text{ }\mu\text{m}$.

Se puede observar que la fuerza de repulsión para una interfase convexa es menor que la correspondiente a una interfase plana para distancias menores que $1 \times 10^{-5}\text{ m}$.

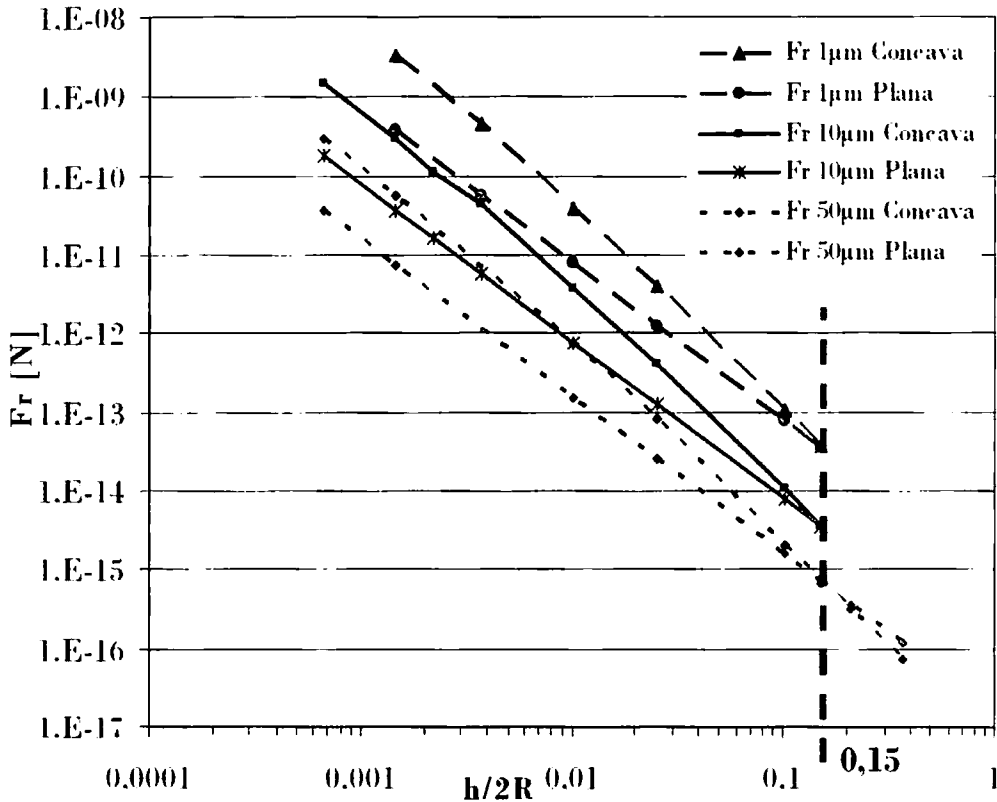


Figura 5.43. Fuerzas de repulsión en función del parámetro $h/2R$ para interfases planas y cóncavas y tres tamaños de partícula de $50\text{ }\mu\text{m}$, $10\text{ }\mu\text{m}$ y $1\text{ }\mu\text{m}$ de radio

En la Figura 5.43 se comparan las fuerzas de repulsión en función del parámetro adimensional $h/2R$ para tres tamaños de partículas de $50\text{ }\mu\text{m}$, $10\text{ }\mu\text{m}$ y $1\text{ }\mu\text{m}$ de radio. Se observa que para valores menores que $h/2R=0,15$ la fuerza de repulsión para interfases cóncavas es mayor que para interfases planas, y para valores mayores que $h/2R=0,15$ esto ya no ocurre. Este resultado se explica teniendo en cuenta que a distancias mayores que $h/2R=0,15$ la interfase es prácticamente plana, es decir, la interacción partícula-interfase es mínima. En el caso de la interfase cóncava, al

aproximarse a la partícula la rodea generando mayor interacción partícula-interfase. De aquí que se puede detectar con mayor claridad la distancia a la cual deja de tener influencia la partícula en la fuerza de repulsión. En cambio, en el caso de la interfase convexa con respecto a la plana esto no ocurre debido a que la interacción partícula-interfase es menor, la curvatura de la interfase no rodea a la partícula, y por lo tanto, no se puede detectar con claridad la distancia a la cual la partícula deja de tener influencia en la fuerza de repulsión.

Se puede concluir entonces que, para valores menores que $h/2R=0,15$

$$Fr \text{ Cóncava} > Fr \text{ Plana} > Fr \text{ Convexa}$$

Referencias

1. P. Casses, M.A. Azouni,. A General theoretical approach to the behavior of foreign particles at advancing solid-liquid interfaces. *Adv Colloid Interface Sci* 1994;50:103–20.
2. A.V. Catalina, S. Mukherjee, and D.M. Stefanescu, “A Dynamic Model for the Interaction between a Solid Particle and an Advancing Solid/Liquid Interface” *Metall. and Mater. Trans.* 31A (2000) 2559
3. J.W. Garvin, H.S. Udaykumar, Particle-solidification front dynamics using a fully coupled approach, part II: comparison of drag expressions, *Journal of Crystal Growth* 252 (2003) 467–479
4. J.W. Garvin, H.S. Udaykumar, Drag on a particle being pushed by a solidification front and its dependence on thermal conductivities, *Journal of Crystal Growth* 267 (2004) 724–737
5. J.W. Garvin, H.S. Udaykumar, Drag on a ceramic particle being pushed by a metallic solidification front, *Journal of Crystal Growth* 276 (2005) 275–280.
6. R. Auras. y C. Schvezov. “Estudio de las Estructuras de Solidificación en Materiales Compuestos de Al-Si y Al-Zn.” *Actas de la Reunión de Comunicaciones Científicas y Técnicas de la UNNE*. Tomo IV, pág. 7-73 a 7-76. 1996. Resistencia. Argentina
7. A.E. Ares, S.F. Gueijman, C.E. Schvezov.” An experimental investigation of the columnar-to-equiaxed grain transition in aluminum-copper hypoeutectic and eutectic alloys” *Journal of Crystal Growth* 312 (2010) 2154–2170

Capítulo 6 Análisis y discusión

6.1 Análisis de curvas de equilibrio en función del tamaño y forma de la interfase

En función de los resultados obtenidos en el Capítulo 5, en el presente capítulo se analizan las curvas de equilibrio para obtener las condiciones de repulsión estacionaria que corresponden a la situación en la cual fuerzas de atracción y repulsión son iguales.

Las curvas de equilibrio relacionan la separación h de equilibrio (h_{eq}) con la velocidad durante la repulsión estacionaria. Para construir la curva de equilibrio se calculan los valores de separación de equilibrio h_{eq} y velocidad de equilibrio V_{eq} a partir de los resultados de las simulaciones presentadas en los capítulos anteriores.

Para las interfases planas se comparan los resultados de fuerza de arrastre de la Sección 5.3, Figuras 5.23 y 5.24 con las de repulsión de la Sección 5.4, Figura 5.35. Para las interfases cóncavas se comparan los resultados de las fuerzas de arrastre de la Figura 5.28, con los de repulsión de la Figura 5.38. Para las interfases convexas se comparan los resultados de las fuerzas de arrastre de la Figura 5.30, con los de repulsión de la Figura 5.40.

Los valores de las fuerzas de repulsión son independientes de la velocidad, por lo tanto en un gráfico de fuerza vs velocidad son líneas horizontales, como se muestra en la Figura 6.1. El punto de intersección entre las fuerzas de arrastre y las de repulsión, para un mismo valor de h y de R , determina el punto de equilibrio. Obteniéndose así la velocidad de equilibrio (V_{eq}) del sistema en estado estacionario de repulsión a ese h_{eq} .

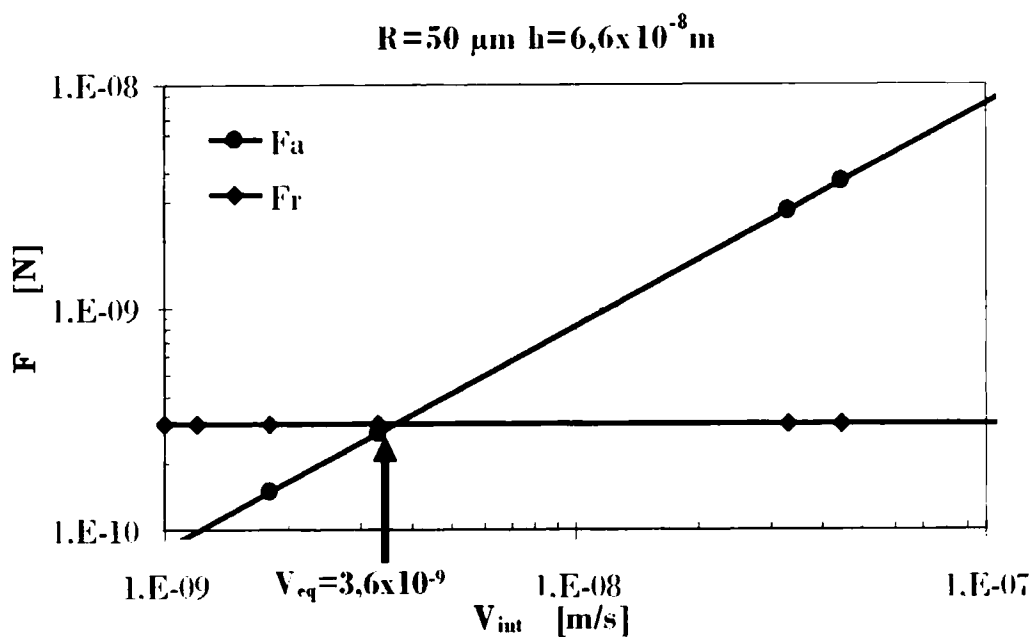


Figura 6.1. Fuerzas de arrastre y repulsión en función de la velocidad de interfase. Radio de partícula = $50\mu\text{m}$. $h=6.6\times 10^{-8}$ m, interfase cóncava.

6.1.1 Caso de interfase plana

Las curvas de equilibrio para el caso de interfases planas y partículas de radio igual a 50, 25, 10, 5, y $1\ \mu\text{m}$ se muestran en la Figura 6.2. En esta figura

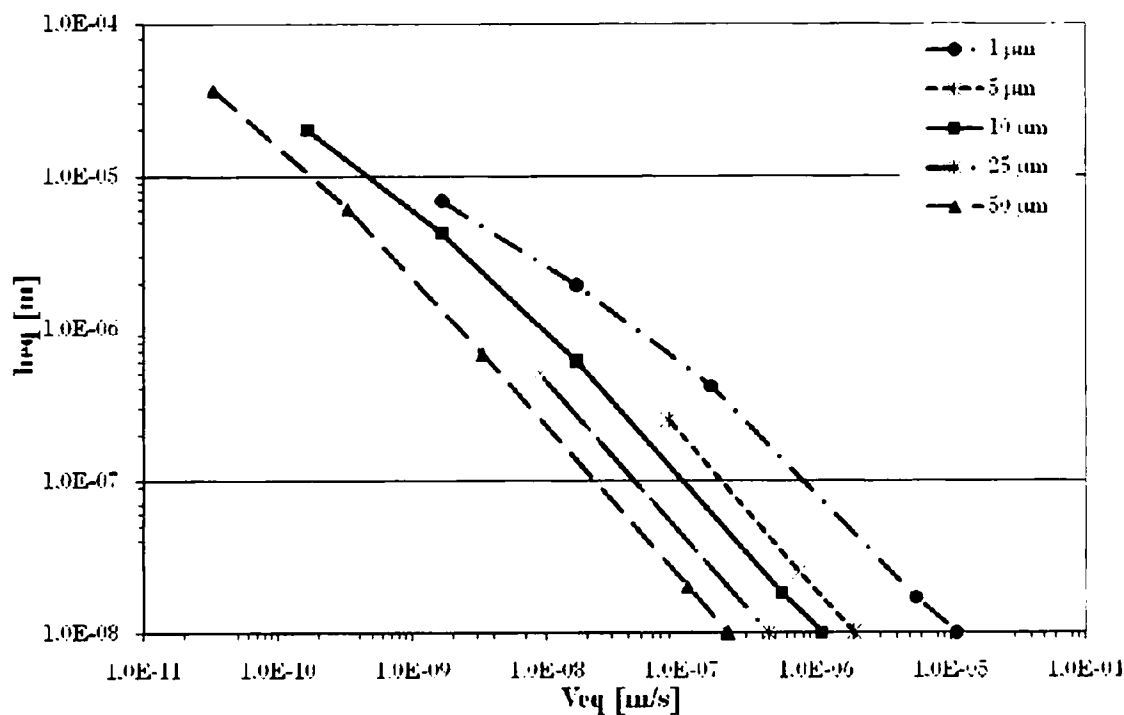


Figura 6.2. Separación h_{eq} en función de V_{eq} para partículas de 50, 25, 10, 5, y $1\ \mu\text{m}$ de radio.

se observa que cuando la velocidad aumenta, la separación h disminuye. La curva para la partícula de $50 \mu\text{m}$ de R tiene un comportamiento casi lineal en un gráfico log-log, mientras que para los otros tamaños son cuasi lineales, se vuelven gradualmente más curvos a medida que disminuye el tamaño de la partícula. Se observa en la Figura 6.2 que a medida que el tamaño de la partícula disminuye la separación de equilibrio aumenta para un misma velocidad.

Además, los valores de h_{eq} calculados con las fuerzas de arrastre obtenidas a partir de la simulación también se pueden calcular a partir de igualar la ecuación de Stokes-modificado Ec.4.5 con la ecuación de Casimir-Lifshitz-van der Waals para interfase plana Ec.4.7, obteniéndose la ecuación 6.1. Esta ecuación describe la velocidad de equilibrio en función del radio de la partícula, la separación h , la viscosidad y la constante B_3 del sistema.

Con el fin de encontrar otras ecuaciones empíricas que puedan relacionar la distancia de separación, h_{eq} , con la velocidad de la interfase de solidificación V_{eq} se proponen y comparan dos funciones diferentes para ajustar los resultados de las simulaciones.

La ecuación 6.1 para predecir la velocidad (V_{eq}) a una dada separación h_{eq} que surge de las expresiones analíticas queda expresada como sigue:

$$v_{eq} = \frac{B_3}{6\mu h_{eq} R} \quad (6.1)$$

La ecuación 6.2 es una primera aproximación a partir de los resultados obtenidos de la simulación, cuya expresión es:

$$v_{eq} = \frac{a_2}{h_{eq}^{b_2}} \quad (6.2)$$

Para obtener la ecuación 6.2 se ajustaron los resultados como se muestra en la Figura 6.3.

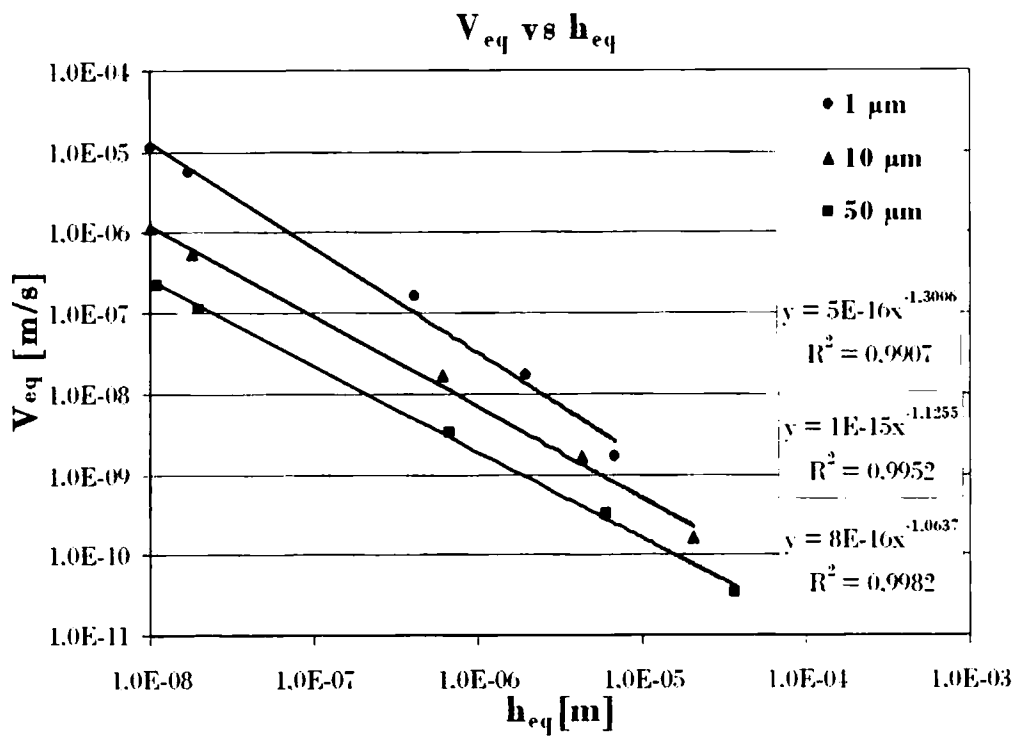


Figura 6.3 Velocidad de equilibrio en función de la separación h_{eq} . Ajustes adoptando la forma de la ecuación 6.2.

Del ajuste realizado a cada R se obtienen los coeficientes a_2 y b_2 como se muestran en la Tabla 6.1.

Tabla 6.1. Constantes de la ecuación 6.2 en función de R.

R [μ m]	a_2	b_2
1	5.00E-16	1,3006
10	1.00E-15	1,1255
50	8.00E-16	1,0637

Se realiza un nuevo ajuste ahora de las constantes a_2 y b_2 en función de R, como se muestra en la Figura 6.4 obteniéndose las siguientes expresiones:

$$a_2 = -1 \times 10^{-18} R^2 + 7 \times 10^{-17} R + 4 \times 10^{-16}$$

$$b_2 = -0,0616 \ln(R) + 1,2909$$

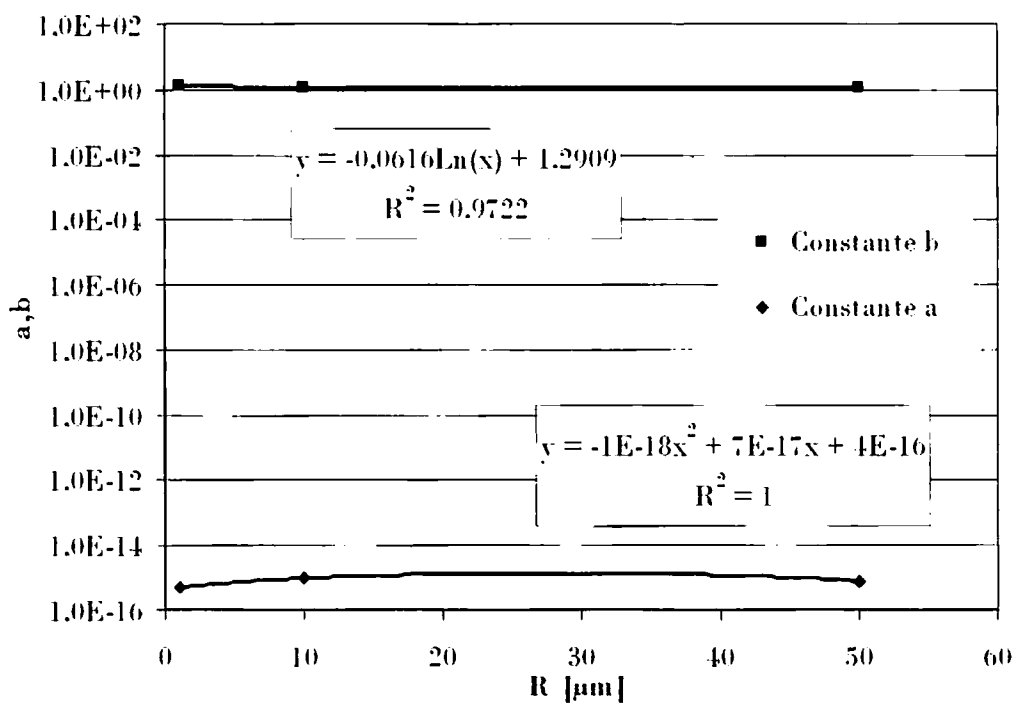


Figura 6.4 Ajuste de las constantes a_2 y b_2 de la ecuación 6.2 en función de R

La ecuación 6.3 se plantea a partir de una segunda aproximación, cuya expresión es:

$$v_{eq} = \frac{a_3}{h_{eq}^{b_3} h_{eq}^{c_3 \log(h_{eq})}} \tag{6.3}$$

Para obtener la ecuación 6.3 se ajustaron los resultados como se muestra en la Figura 6.5:

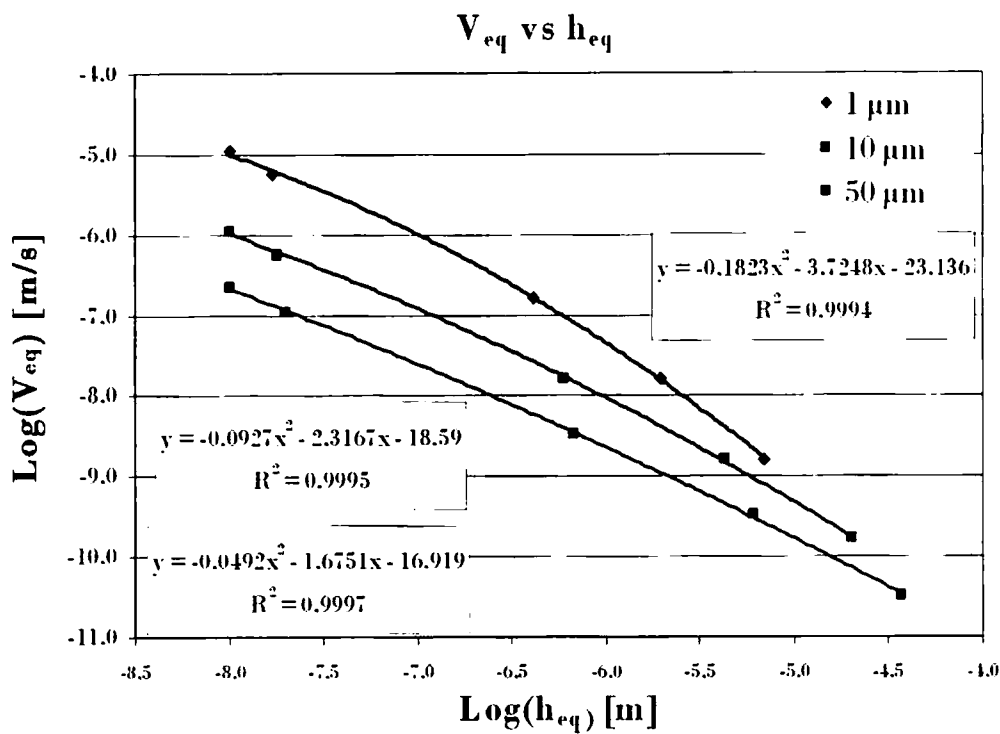


Figura6.5 Velocidad de equilibrio en función de la separación h_{eq} . Ajustes adoptando la forma de la ecuación 6.3

Del ajuste realizado a cada R se obtienen los coeficientes a_3 , b_3 y c_3 como se muestran en la Tabla 6.2

Tabla 6.2 Constantes a_3 , b_3 y c_3 de la ecuación 6.3 en función de R

R [μm]	a_3	b_3	c_3
1	2,31E+01	3,7248	0,1823
10	1.86E+01	2,3167	0,0927
50	1,69E+01	1,6751	0,0492

En esta ecuación también se realiza un ajuste de las constantes a_3 , b_3 y c_3 en función de R como se observa en la Figura 6.6.

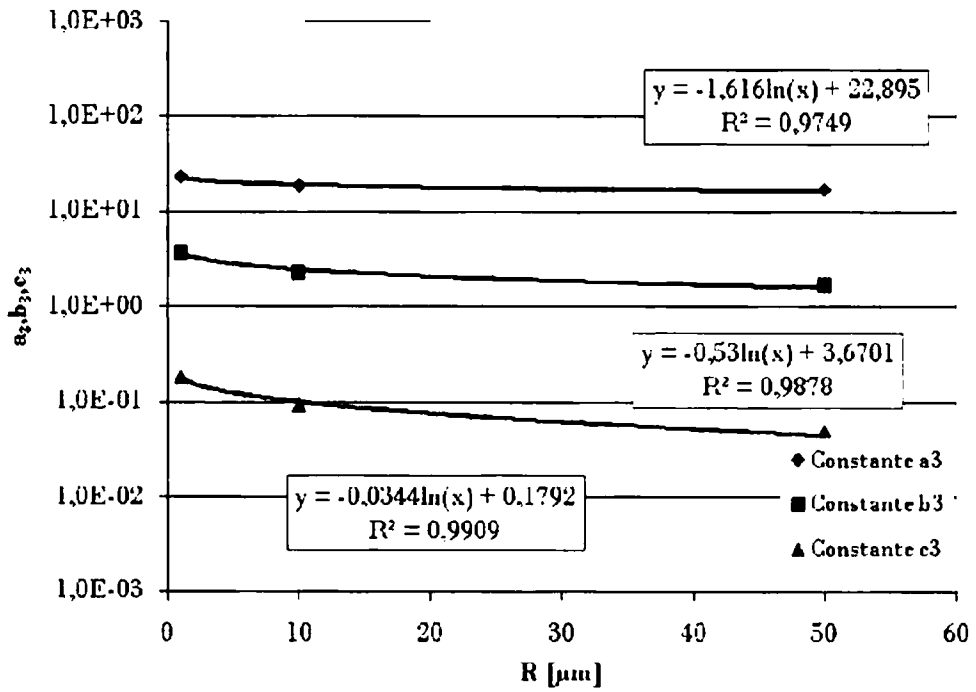


Figura 6.6 Ajuste de las constantes a_3 , b_3 y c_3 de la ecuación 6.3 en función de R

Obteniéndose las siguientes expresiones:

$$a_3 = -1,616\ln(R) + 22,895$$

$$b_3 = -0,53\ln(R) + 3,6701$$

$$c_3 = -0,0344\ln(R) + 0,1792$$

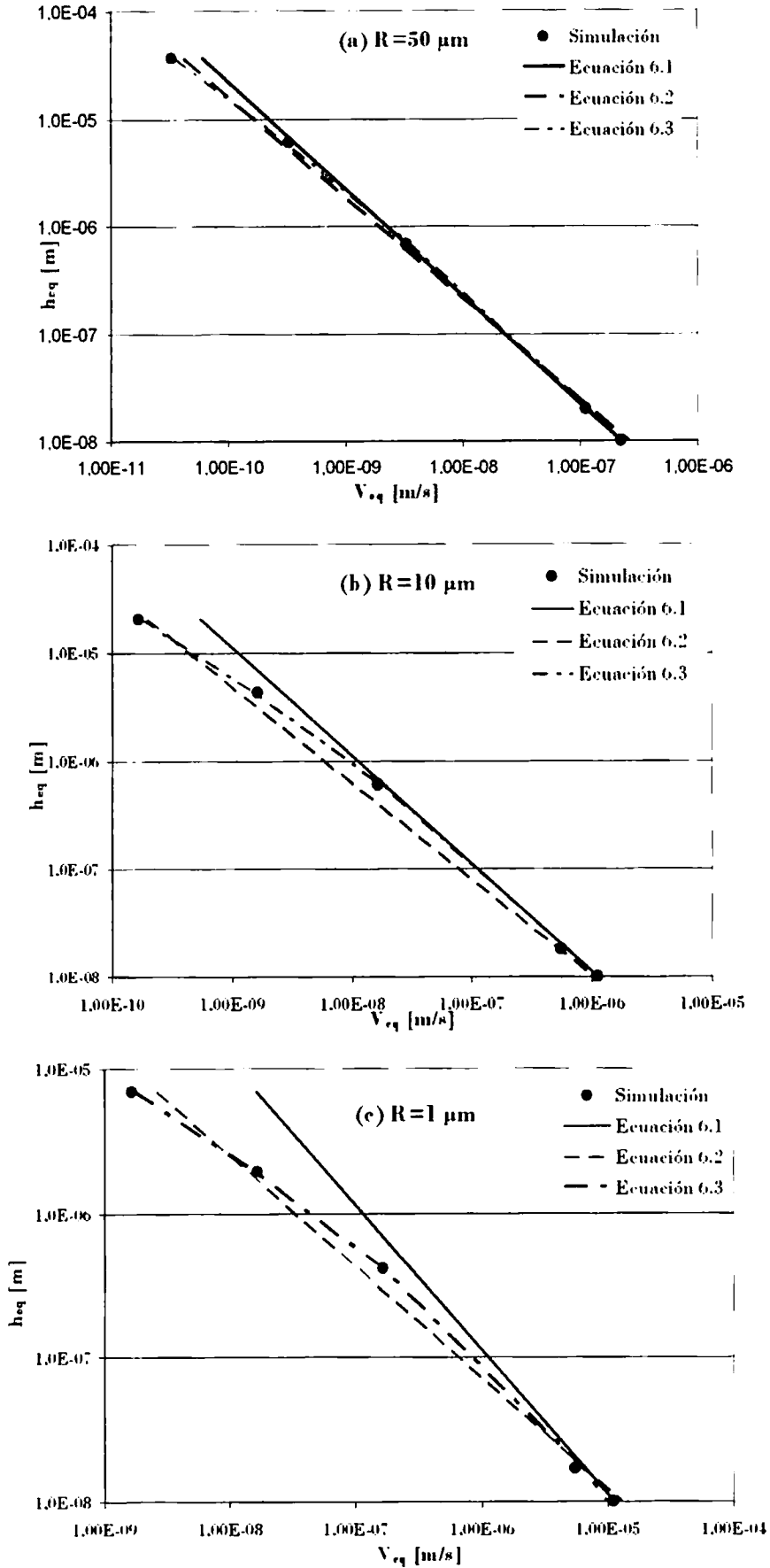


Figura 6.6. Comparación de los resultados de las simulaciones con las ecuaciones 6.1, 6.2 y 6.3 para partículas de a) $50 \mu\text{m}$, b) $10 \mu\text{m}$, y c) $1 \mu\text{m}$ de radio.

En la Figura 6.6 se comparan las curvas de h_{eq} vs V_{eq} para cada ecuación. Se observa que para valores de R grandes, las tres ecuaciones se comportan de manera similar. Para valores de R pequeños la ecuación 6.3 es la que mejor se ajusta a los resultados del modelo numérico.

La ecuación 6.2 tiene la ventaja de ser más simple que la ecuación 6.3, pero la ecuación 6.3 se ajusta mejor en todo el rango simulado. Para valores de R elevados, el término $h_{eq}^{c \cdot \log(h)}$ se aproxima a 1 y por lo tanto, adopta la forma de la ecuación 6.2.

Las curvas de equilibrio permiten determinar la velocidad crítica de equilibrio, la cual por definición es la velocidad de equilibrio cuando $h=10^{-8}\text{m}$, que es la distancia mínima, h_{min} , para que un fluido conserve las propiedades que lo definen (Capítulo 2.2). Se observa en la Figura 6.6 que las tres ecuaciones; 6.1, 6.2 y 6.3 coinciden cuando la separación h corresponde al h_{min} . De aquí surge que sea posible calcular la velocidad crítica para otros valores de R que no fueron modelados utilizando cualquiera de las tres ecuaciones, como se mostrará más adelante.

El uso de estas ecuaciones tiene la ventaja práctica de que, conociendo el tamaño de la partícula es posible predecir el rango de velocidades de solidificación en el cual se produce la repulsión estacionaria.

Por otro lado, se calcularon las velocidades de equilibrio para una partícula de $5\text{ }\mu\text{m}$ de radio utilizando las tres ecuaciones 6.1, 6.2 y 6.3 como se puede ver en la Tabla 6.3. Se evalúa con cuál de las tres ecuaciones se obtienen mejores resultados, para lo cual se calculan las fuerzas de arrastre obtenidas con el modelo de elementos finitos utilizando estas velocidades que luego se comparan con las fuerzas de repulsión calculadas a partir de la ecuación 4.6.

Tabla 6.3. Predicciones de V_{eq} utilizando las ecuaciones 6.1, 6.2 y 6.3.

R=5 μm	h_{eq}	V_{eq}	$F_a \text{ Sim}$	F_{rep}	F_r/F_{aSim}
Ecuación 6.1	1,10E-08	2,02E-06	1,46E-10	1,30E-10	0,888
	2,50E-08	8,89E-07	2,97E-11	2,51E-11	0,847
	2,50E-07	8,89E-08	2,73E-13	2,51E-13	0,921
	5,00E-06	4,44E-09	1,36E-15	6,28E-16	0,461
	2,50E-05	8,89E-10	1,66E-16	2,51E-17	0,152
Ecuación 6.2	1,10E-08	2,21E-06	1,60E-10	1,30E-10	0,810
	2,50E-08	8,32E-07	2,78E-11	2,51E-11	0,904
	2,50E-07	5,35E-08	1,64E-13	2,51E-13	1,530
	5,00E-06	1,51E-09	4,62E-16	6,28E-16	1,359
	2,50E-05	2,21E-10	4,11E-17	2,51E-17	0,611
Ecuación 6.3	1,10E-08	1,92E-06	1,42E-10	1,30E-10	0,916
	2,50E-08	9,23E-07	3,08E-11	2,51E-11	0,816
	2,50E-07	8,07E-08	2,48E-13	2,51E-13	1,015
	5,00E-06	1,44E-09	4,43E-16	6,28E-16	1,417
	2,50E-05	1,12E-10	2,08E-17	2,51E-17	1,209

Debido a que el sistema se estudia en estado estacionario de repulsión, el criterio de una buena predicción que se utiliza en la Tabla 6.3, es que la fuerza de arrastre y la fuerza de repulsión sean iguales, es decir cuando F_r/ F_a es igual a 1. Se observa que utilizando la ecuación 6.1 se obtienen valores de velocidad cercanos a los de la velocidad de equilibrio (V_{eq}) para valores de separación h_{eq} menores que el radio de la partícula. La ecuación 6.3 proporciona buenas predicciones en todo el rango de separación h modelado, los valores calculados son ligeramente mayores al de equilibrio en casi todos los casos.

De estas observaciones se puede afirmar que la ecuación 6.3 predice mejor las condiciones de repulsión para partículas menores a 10 μm y la ecuación 6.1 resulta más adecuada para partículas de mayor tamaño.

6.1.2 Caso de interfase cóncava

En la Figura 6.7 se muestran las curvas de equilibrio obtenidas para las interfases cóncavas superpuestas con las curvas de equilibrio para las interfases planas para partículas de radio de $1\ \mu\text{m}$, $10\ \mu\text{m}$ y $50\ \mu\text{m}$.

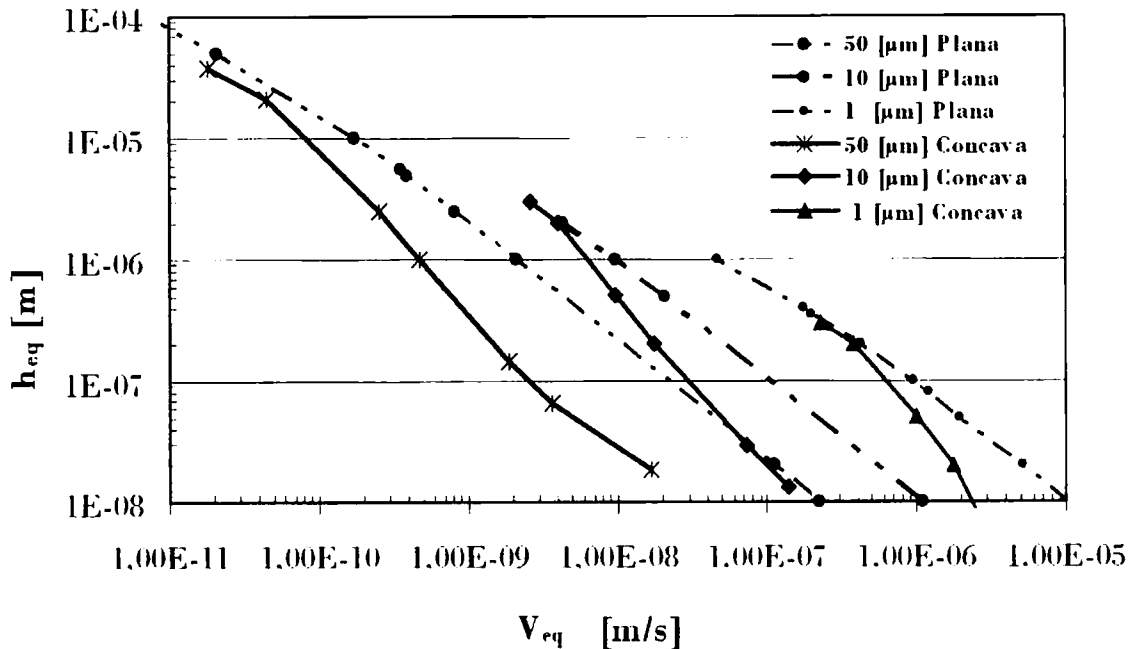


Figura 6.7. Curvas de equilibrio para las interfases cóncava y plana. $R = 1, 10$ y $50\ \mu\text{m}$

En la figura se observa que cuando la velocidad aumenta, la separación h de equilibrio disminuye, ya sea que se trate de las interfases cóncavas o de las planas, para los 3 tamaños de partículas considerados. Para una interfase cóncava se observa un punto de inflexión para los tres tamaños de partículas considerados que se diferencia del caso de la interfase plana, que muestra una relación casi lineal entre h_{eq} , V_{eq} .

Si se analiza el comportamiento de las curvas de equilibrio para las partículas de un mismo tamaño se observa que para cada una hay una región donde las curvas de interfases plana y cóncava se superponen. Esto se da en la región de bajas velocidades en donde la interfase está más alejada de la partícula. Así, para un radio de partícula de $50\ \mu\text{m}$, esta región comprende

velocidades menores a 4×10^{-11} m/s; y para partículas de 1 micrón de radio la región comprende velocidades menores a 3×10^{-7} m/s.

Al aumentar la velocidad de las interfases las separaciones de las curvas de equilibrio difieren entre las interfases plana y cóncava. Esta diferencia alcanza un valor de hasta un orden de magnitud menor para las interfases cóncavas.

Las curvas de equilibrio permiten determinar la velocidad crítica de equilibrio. La velocidad crítica en el caso de las interfases cóncavas se determina por extrapolación, utilizando los resultados de la Figura 6.7. Los valores que se obtienen son un orden de magnitud menor que para una interfase plana. Por lo tanto, a una misma velocidad de movimiento de la interfase, la partícula se ubica más lejos de una interfase plana que de una interfase cóncava. Estos resultados indican que la velocidad de solidificación en que se produce el atrapado de la partícula por el sólido, V_c , cuando la interfase es cóncava es menor que cuando la interfase es plana. Esto es lógico, ya que las fuerzas de arrastre son mayores cuando las interfases son cóncavas que cuando son planas.

6.1.3 Caso de interfase convexa

En la Figura 6.8 se comparan las curvas de equilibrio para las interfases convexas y las planas, para partículas de radio de 1 μm , 10 μm y 50 μm . Para una interfase convexa se observa un punto de inflexión para los tres tamaños de partículas considerados que se diferencia del caso de la interfase plana, que muestra una relación casi lineal entre h_{eq}, V_{eq} . Se observa que cuando la velocidad de equilibrio de la interfase aumenta, el h de equilibrio disminuye, tanto en las interfases convexas como en las planas, para los 3 tamaños de partículas. A bajas velocidades ambas interfases dan valores de separación h_{eq}

similares y al aumentar la velocidad de las interfases, la diferencia entre las separaciones de equilibrio entre las interfases planas y las convexas aumenta. La velocidad crítica se calcula por extrapolación de manera similar a como se procedió para la interfase cóncava.

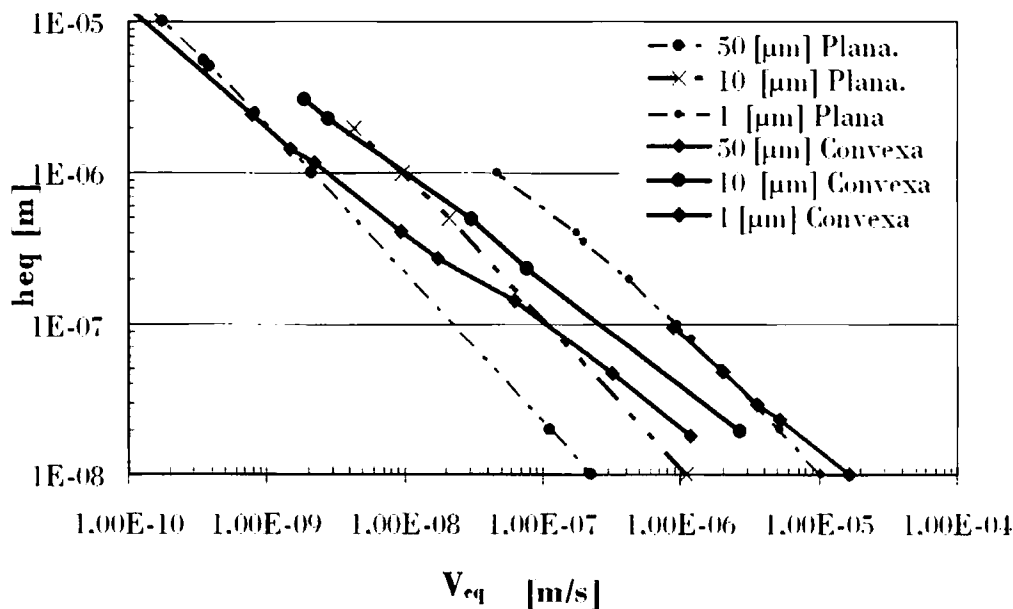


Figura 6.8. Curvas de equilibrio para interfases convexas y plana. $R=1, 10$ y $50 \mu m$.

Los resultados muestran que la velocidad crítica para una interfase convexa es un orden de magnitud mayor que para una interfase plana. Por lo tanto, a una misma velocidad la partícula se ubica más lejos cuando la interfase es convexa a que cuando es plana. Esto es lógico, ya que las fuerzas de arrastre y la interacción partícula-interfase son menores cuando las interfases son convexas que cuando son planas,

Se puede concluir entonces que, las velocidades en que se produce el atrapado de la partícula, V_c , para las interfases cóncavas son menores que para las interfases planas y las V_c para interfases convexas son mayores que para las interfases planas, esto es:

$$V_{c(c\acute{o}ncava)} < V_{c(plana)} < V_{c(convexa)}$$

6.2 Comparación de los valores de equilibrio obtenidos de las simulaciones con los resultados experimentales

Los resultados experimentales de velocidades críticas para una gran variedad de tamaños de partículas, formas y materiales, los cuales fueron reportados en la literatura por diversos autores se agrupan y grafican todos juntos en la Figura 6.9. En esta Figura se observa que a excepción del SiO₂ y del Pyrex, todos los materiales presentan una tasa de variación semejante. Además se observa que en todos los casos cuando el tamaño de partícula aumenta la velocidad crítica disminuye.

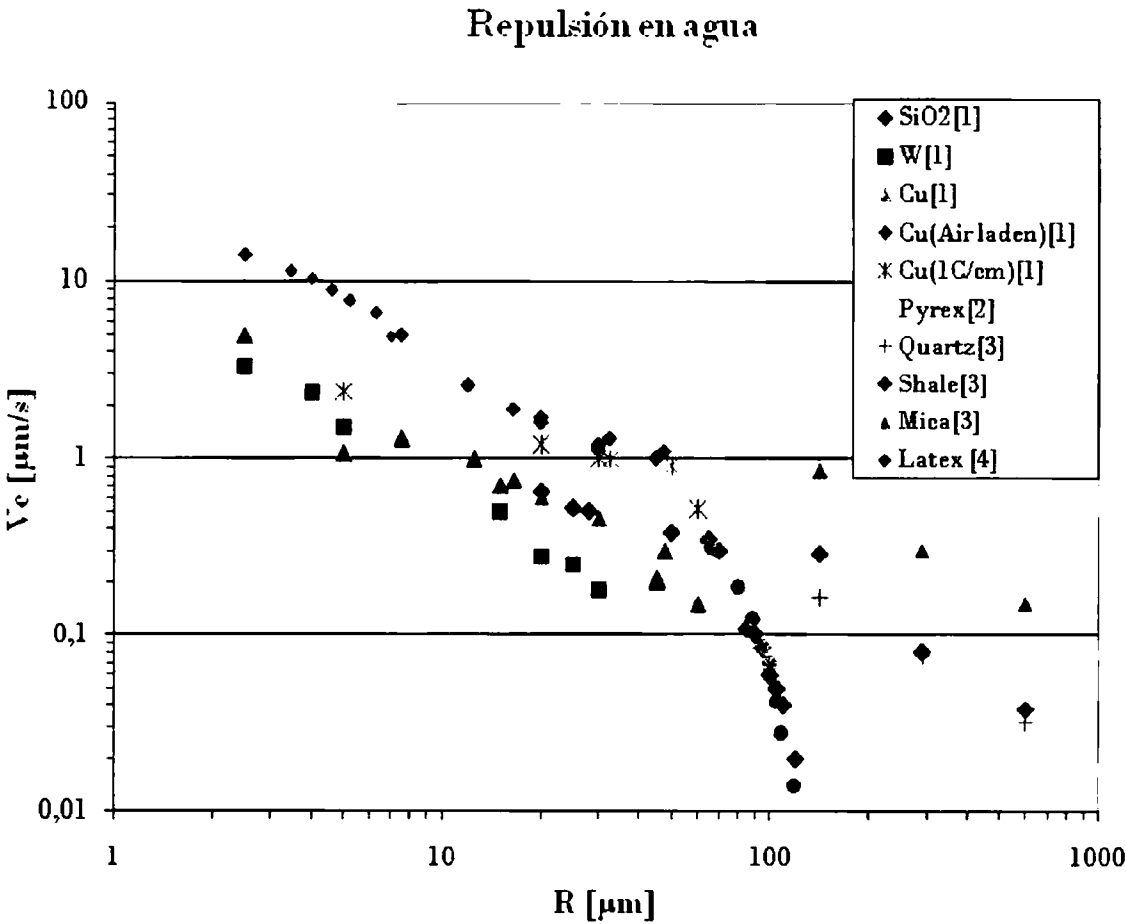


Figura 6.9. Velocidades críticas para *repulsión* en agua.

Las velocidades críticas (V_c) obtenidas de la simulación para una interfase plana se comparan con los resultados experimentales obtenidos a partir de la literatura donde la matriz es agua.

Para comparar los resultados obtenidos en las simulaciones con los experimentales debe hacerse una corrección de la viscosidad. Las simulaciones fueron calculadas con una viscosidad igual a $1,5 \times 10^{-3}$ Pa.s y los resultados experimentales con la viscosidad del agua igual a 10^{-3} Pa.s. De acuerdo al procedimiento seguido para calcular la velocidad crítica, la misma se determinó como el valor de la velocidad de equilibrio a la cual el h_{eq} es igual a 10^{-8} m. Los valores de V_{eq} se obtuvieron de los valores donde se intersectan la curvas correspondientes a las fuerzas de arrastre y a las fuerzas de repulsión, ver Figura 6.1 (donde se muestra un ejemplo gráfico del procedimiento utilizado). Se ha visto que la fuerza de repulsión es independiente de la velocidad y de la viscosidad. Por otro lado, la fuerza viscosa se define como:

$$F_{\text{viscosa}} = \text{Viscosidad} \times \text{Área} \times \text{Gradiente de velocidad} \quad (6.4)$$

Debido a que las fuerzas viscosas son las que producen las fuerzas de arrastre, si cambia la viscosidad el valor de la fuerza de arrastre se puede obtener simplemente multiplicando el valor de la fuerza de arrastre por la relación entre las viscosidades agua-simulación. Esto se traslada a que sea suficiente con multiplicar por el mismo factor los valores de la velocidad crítica como sigue:

$$V_{c(\text{agua})} = V_{c(\text{Sim})} \left(\frac{\mu_{\text{sim}}}{\mu_{\text{agua}}} \right) \quad (6.5)$$

Donde $V_{c(\text{agua})}$ es la velocidad crítica en agua, $V_{c(\text{sim})}$ es la velocidad crítica simulada, μ_{agua} , es la viscosidad del agua y μ_{sim} , es la viscosidad simulada.

Los valores de velocidad crítica para el agua fueron modelados y también calculados utilizando la ecuación 6.5 como se observa en la Tabla 6.4, en

donde los valores de velocidad obtenidos en la simulación para aluminio simplemente se multiplican por 1.5. Se observa que la ecuación 6.5 es una buena aproximación de los valores de velocidad crítica para agua cuando no se dispone del tiempo suficiente para modelar el sistema.

Tabla 6.4 Velocidades críticas para matrices de Aluminio y Agua considerando Interfases Planas

Interfase Plana	Radio [μm]	Velocidades [m/s]			
		Matriz aluminio	Matriz agua Simulado	Matriz agua (Ec. 6.5)	Matriz agua (Sim/Ec. 6.5)
	50	2,22E-07	4,00E-07	3,33E-07	1,201
	10	1,10E-06	1,65E-06	1,65E-06	0,997
	1	9,75E-06	1,47E-05	1,46E-05	1,005

Para el análisis se grafican en la Figura 6.10 las V_c en función del radio R de la partícula, junto con los resultados experimentales. Se observa que tanto en el modelo obtenido a partir de la simulación, como en los resultados experimentales, la V_c aumenta a medida que el radio disminuye. La mayoría de los puntos experimentales tienen una tendencia igual a la del modelo simulado, y éste además pasa por el centro de la mayoría de los puntos experimentales.

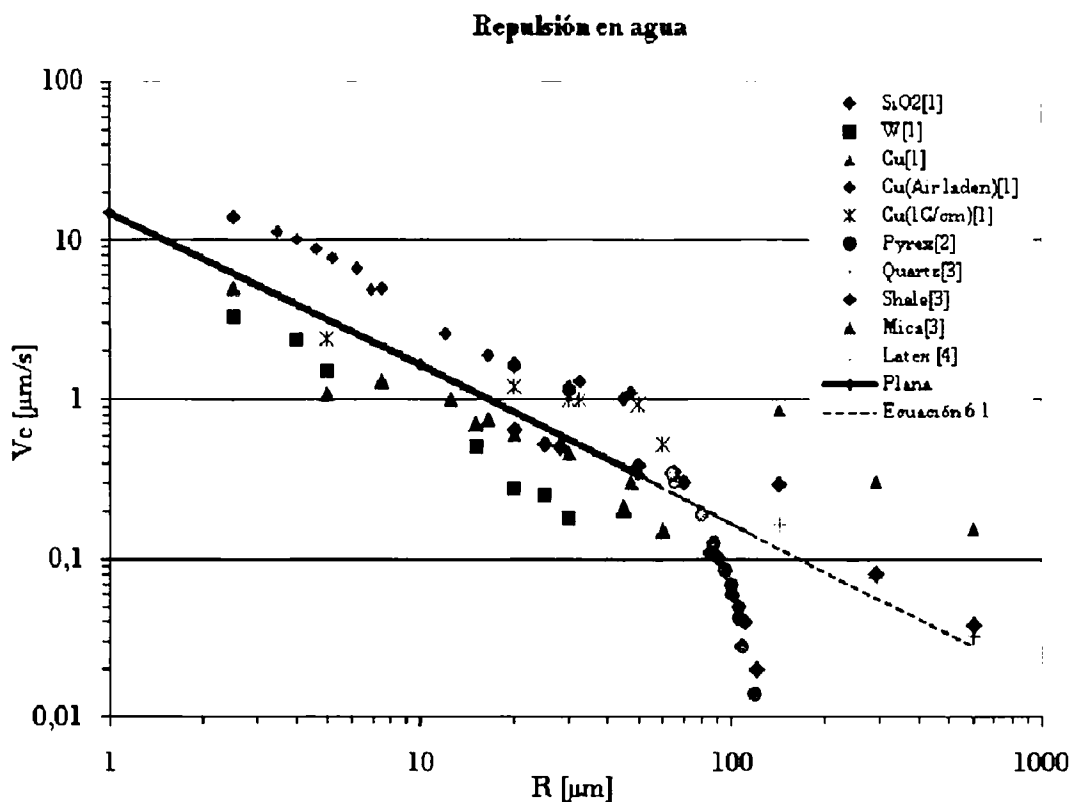


Figura 6.10 Resultados experimentales y del modelo de velocidades críticas para *repulsión en agua*

Una estimación de la dispersión de los datos para cada R , sin considerar las curvas correspondientes al SiO₂ [1] y al Pyrex [2], los cuales presentan una tasa de variación diferente al resto de los materiales, están dadas por la siguiente expresión:

$$\log V_c \pm A^* \tag{6.6}$$

Donde $A^* = \text{promedio}(\log(V_{\max})_i - \log(V_{\min})_i)$, y V_c es calculada con la ecuación 6.1.

Algunos de los valores de dispersión obtenidos se presentan en la Tabla 6.5.

Tabla 6.5. Cálculos de la dispersión para varios valores de R .

$R \text{ } [\mu\text{m}]$	A^*	$\log (V_c [\mu\text{m/s}])$
2,5	0,313807	0,823910
5	0,429335	0,522880
30	0,429335	-0,255272
50	0,282136	-0,454844
291	0,298191	-1,242043

De la cuantificación de la dispersión de los puntos experimentales con respecto al modelo simulado, se puede ver que el error, que está representado por el término A^* en la Tabla 6.5, es en la peor de las situaciones de un 43%. Este resultado nos está indicando que el modelo simulado representa satisfactoriamente el sistema de *repulsión* en agua en el rango de R comprendido entre 2,5 y 291 μm .

La discrepancia posible entre los datos de Pyrex [2] y SiO_2 [1] con la tendencia de los otros datos experimentales y de la ecuación 6.1 podrían sugerir que éstos datos tienen algún comportamiento más complejo que los considerados en los modelos analíticos que derivan en la ecuación 6.1.

Los valores de las velocidades críticas calculadas para las interfaces convexas y cóncavas en aluminio y en agua se muestran en la Tabla 6.6.

Las velocidades críticas simuladas para interfaces cóncavas, planas y convexas en agua se muestran en la Figura 6.11 donde también se representan los resultados experimentales.

Tabla 6.6 Velocidades críticas para matrices de Aluminio y Agua considerando a) Interfases Convexas y b) Interfases Cóncavas

a)

Interfase Convexa	Radio [μm]	Velocidades [m/s]	
		Matriz aluminio	Matriz agua Simulado
	50	2,00E-06	2,80E-06
	10	7,00E-06	6,80E-06
	1	1,65E-05	2,45E-05

b)

Interfase Cóncava	Radio [μm]	Velocidades [m/s]	
		Matriz aluminio	Matriz agua Simulado
	50	3,00E-08	5,05E-08
	10	1,00E-07	1,80E-07
	1	2,00E-06	2,40E-06

Se observa en la Figura 6.11 que el modelo de la interfase cóncava predice valores de velocidades críticas menores que los resultados experimentales, y que el modelo de la interfase convexa predice velocidades críticas mayores que las experimentales.

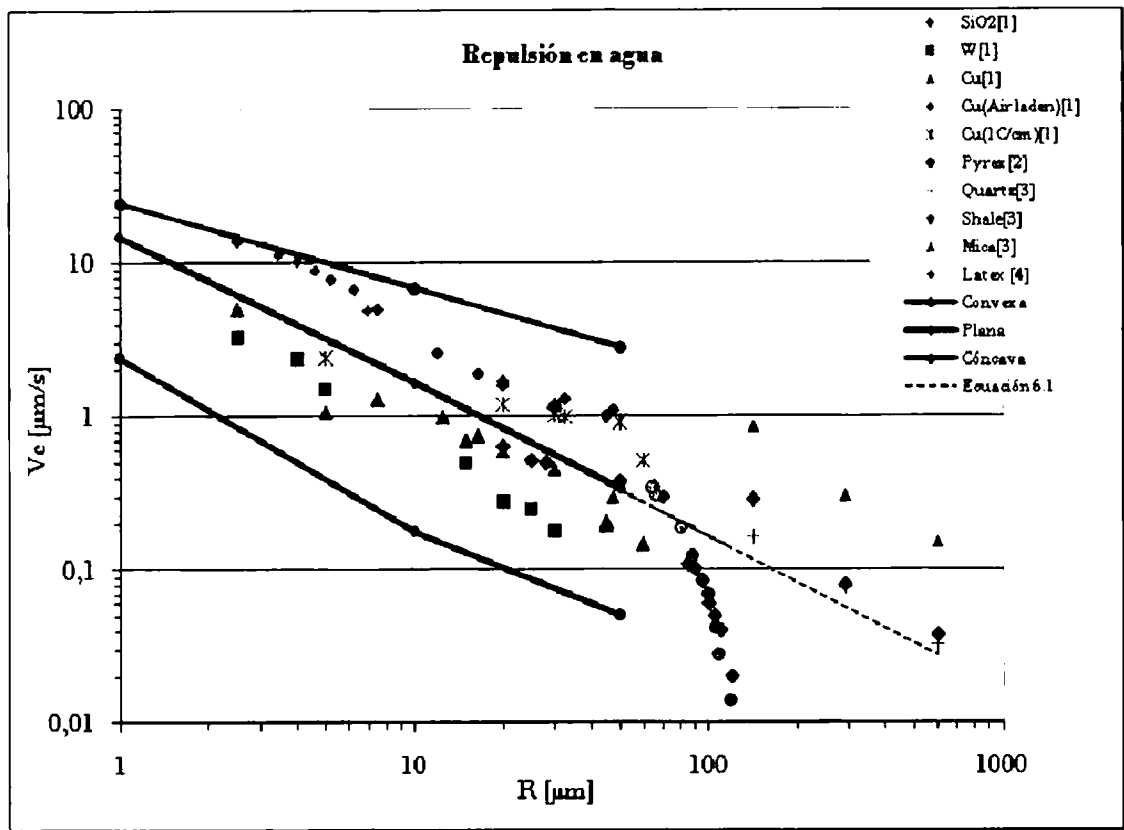


Figura 6.11. Resultados experimentales de velocidades críticas para repulsión en agua y predicciones de los modelos para interfases planas, cóncavas y convexas

Se enfatiza nuevamente que en el modelo presentado, se consideran solamente las fuerzas de Lifshitz-van der Waals y en matrices como el agua, las fuerzas polares podrían llegar a ser más fuertes que las fuerzas de Lifshitz-van der Waals.

Por otra parte respecto a la configuración convexa se puede observar que la partícula se encuentra en un estado inestable y puede llegar a rodar (desplazarse) adoptando la configuración cóncava con facilidad. En las experiencias reportadas [1-4] y cuyos datos son utilizados en la Figura 6.11 las partículas no son esféricas en la mayoría de los casos. Una partícula con forma irregular cuya cara plana se ubique frente a la interfase de solidificación genera mayores fuerzas de arrastre y, consecuentemente, menores velocidades críticas.

Para ilustrar esto, a continuación se calculan las velocidades críticas con partículas semiesféricas para interfaces convexas y dos tamaños de partículas, los resultados se muestran en la Figura 6.12. Se puede ver que las velocidades críticas calculadas se ubican entre las velocidades críticas para interfaces planas y convexas, y las partículas esféricas.

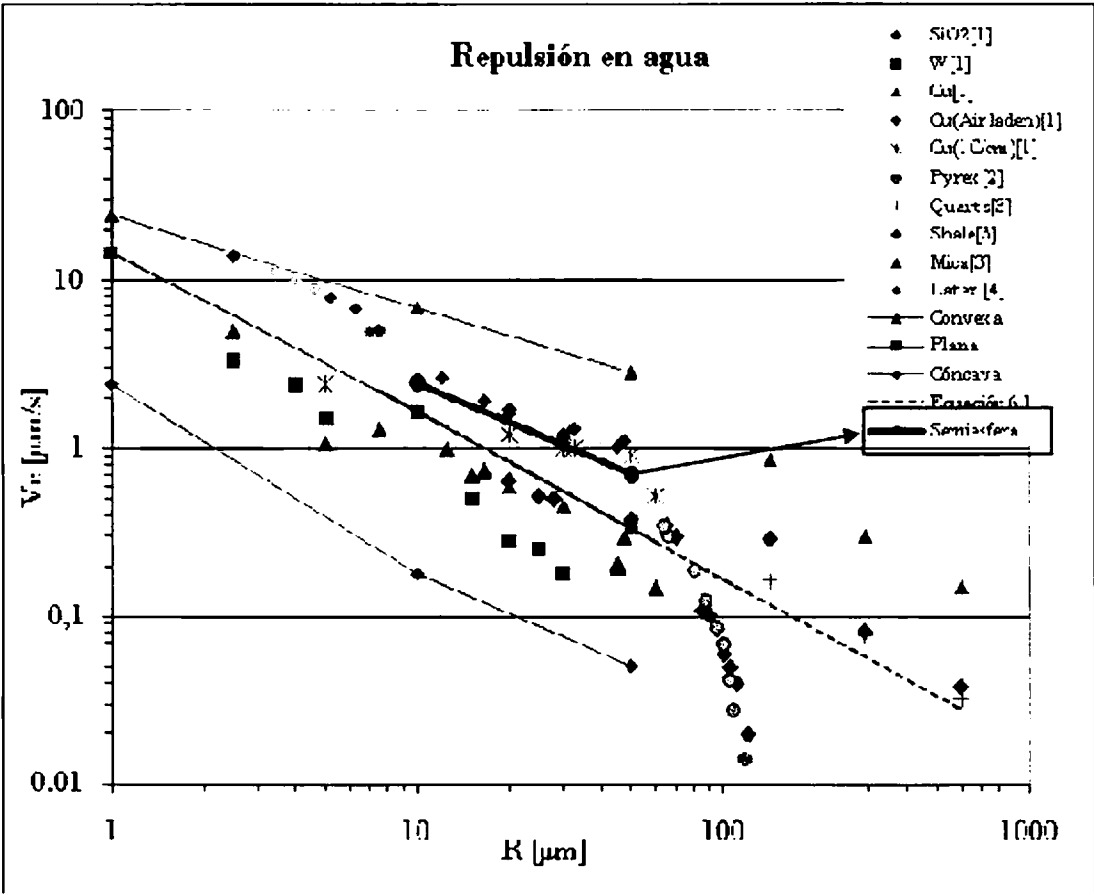


Figura 6.12. Resultados experimentales de velocidades críticas para repulsión en agua y predicciones de los modelos para partículas esféricas con interfaces planas, cóncavas, convexas y partículas semiesféricas con interfaces convexas

Teniendo en cuenta que se han estudiado partículas esféricas con interfaces planas y dos interfaces curvas, una convexa y otra cóncava, y que los modelos consideran fuerzas de arrastre y de repulsión, se observa una buena predicción de los valores experimentales de repulsión reportados en la literatura. Las diferencias particulares observadas para cada material pueden ser aproximadas teniendo en cuenta la apropiada relación entre k_p y k_L , que define la geometría de la interfase, así como la forma de la partícula presente.

De estos resultados se concluye que se puede establecer el rango en el que se produce el estado estacionario de repulsión, que es la sección sombreada en la Figura 6.13.

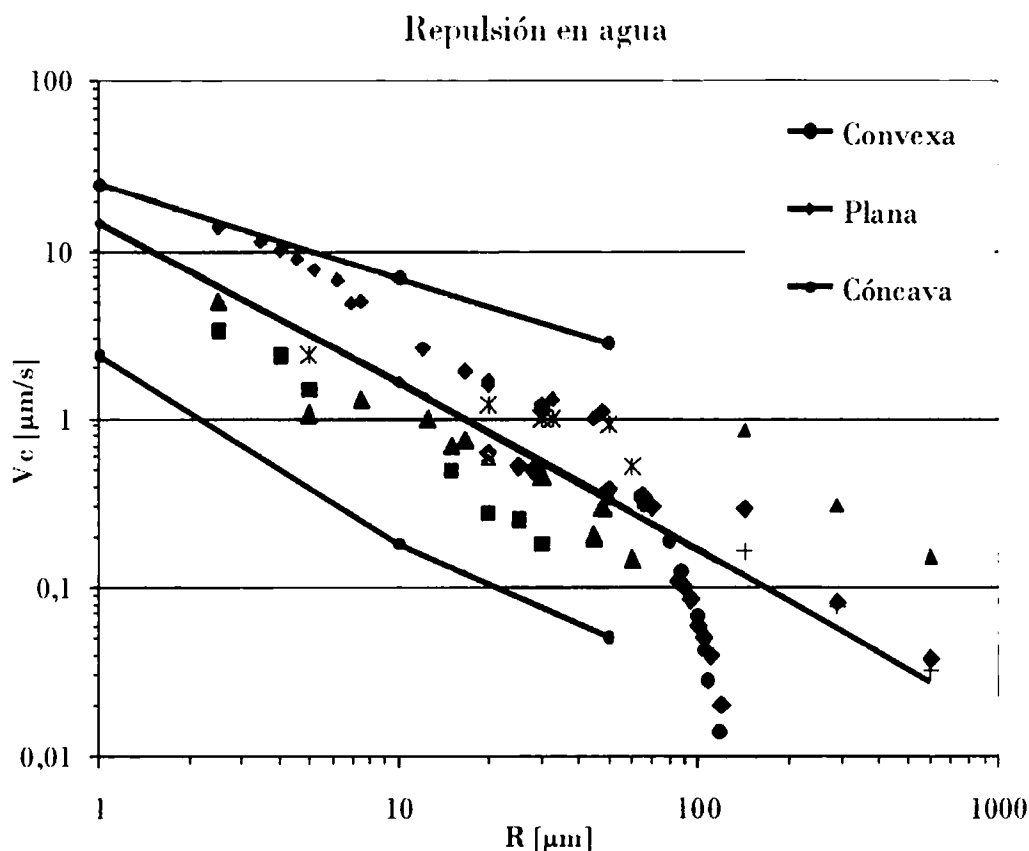


Figura 6.13. Rango de predicción de repulsión en agua comparado con resultados experimentales.

Referencias

1. J. Cisse and G. F. Bolling, "The steady state rejection of insoluble particles by salol grown from the melt" *Journal of Crystal Growth* 11 (1971) 25-28
2. P. Hoekstra and D. R. Miller, "On the Mobility of Water Molecules in the transition Layer between Ice and a Solid Interface; *J. of Colloid. Interface Sci.*, 25, (1967), p. 166.
3. AE Corte "Vertical Migration of Particles in Front of a Moving Freezing Plane"; *J. of Geophysical Res.*, Vol 67(3) (1962), 1085-1090.
4. Ch. Körber - G. Rau y M.D. Cosman-E.G. Cravalho, "Interaction of Particles and a Moving Ice-liquid Interface"; *J. of Crystal Growth*, 72, (1985), p. 649.

Capítulo 7 Conclusiones

Las conclusiones pueden resumirse como sigue:

a) El flujo de fluidos en el modelo de simetría axial da resultados similares al modelo tridimensional, por lo tanto resulta adecuado para simular las fuerzas de arrastre que actúan sobre una partícula esférica.

b) Las formas de interfase obtenidas a partir del modelo axi-simétrico son más planas que las interfases del modelo bidimensional por lo que el modelo axi-simétrico resulta más apropiado

c) La forma de la interfase depende de las conductividades térmicas de la partícula y de la matriz. La interfase es plana cuando las conductividades son iguales, cóncava cuando la conductividad de la partícula es mayor que la de la matriz y convexa en el caso opuesto.

d) La forma de la partícula afecta la forma de la interfase en forma significativa cuando las distancias partícula-interfase son menores que el radio de la partícula.

e) El grado de deformación de la interfase depende de la forma de la partícula.

f) Una partícula conductora semiesférica genera poros por el líquido encerrado entre la interfase y la partícula.

g) La forma de las interfases de solidificación se ven afectadas por la velocidad de extracción de calor. A mayor extracción se genera el mayor gradiente térmico y la interfase es más plana que la obtenida con una menor extracción de calor en cercanías de la partícula.

h) La fuerza de arrastre simulada numéricamente es siempre mayor que la obtenida a partir de la expresión de Stokes-Modificada. La relación entre ambas tiende a 1 cuando la distancia desde la interfase disminuye. Esta relación es independiente de la velocidad de la interfase.

i) Las fuerzas de arrastre y las fuerzas de repulsión obtenidas con el modelo son significativamente mayores para la interfase cóncava respecto a una interfase plana, y significativamente menores para interfases convexas con respecto a una interfase plana.

j) La separación de equilibrio obtenida por el modelo numérico es inversamente proporcional a la velocidad de la interfase.

k) Se encontraron ecuaciones empíricas que describen las condiciones de equilibrio del estado estacionario de repulsión para interfases planas. La ventaja práctica de utilizar estas expresiones es que, conociendo el tamaño de la partícula se predice el rango de velocidades de solidificación en el cual se produce la repulsión estacionaria.

l) El modelo que describe las condiciones de equilibrio entre h_{eq} , V_{eq} para interfases cóncava y convexa tiene un punto de inflexión que se diferencia del caso de interfase plana que muestra una relación casi lineal.

m) La separación de equilibrio entre la partícula y la interfase en el estado de repulsión estacionario es un orden de magnitud menor para un interfase cóncava que para una interfase plana.

n) La separación de equilibrio entre la partícula y la interfase en el estado de repulsión estacionario es un orden de magnitud mayor para un interfase convexa que para una interfase plana.

o) A bajas velocidades de solidificación, la separación de equilibrio en una interfase cóncava es similar a la de la interfase plana. Lo mismo sucede con las interfases convexas, que a bajas velocidades de solidificación presentan una separación de equilibrio similar al de la interfase plana.

p) De la comparación con los resultados experimentales se concluye que se puede predecir el rango de velocidades de solidificación en el que se produce el estado estacionario de repulsión.

COMISION NACIONAL DE ENERGIA ATOMICA CENTRO DE INFORMACION CAC

Referencias Bibliográficas

Referencias del Capítulo 1. Introducción

1. M. V. Pikunov, The behavior of suspended impurities during crystallization. Non ferrous metals, their treatment and working (Moscow: Metallurgizdat, 1957), 56-67.
2. D. R. Uhlmann, B. Chalmers and K. A. Jackson, "Interaction between particles and a solid-liquid interface", J. Applied Physics, 35 (1964), 2986-2993
3. S.N. Omenyi, A.W. Neumann, "Thermodynamic Aspects of Particle Engulfment by Solidifying Melts", J. Appl. Phys, 47 (1976), 3956-3962..
4. A. A. Chernov, D. E. Temkin, S. M. Mel'nikova. "Theory of the capture of solid inclusions during the growth of crystals from the melt", Sov. Phys. Crystallogr., 21(4) (1976), 369-379..
5. J. Cisse and G. F., Bolling, "A theory for the interaction of particles with a solidifying front", J. of Crystal Growth, 10 (1971), 67-76.

Referencias del Capítulo 2. Marco teórico y revisión bibliográfica

1. <http://www.tecmasters.com/space-technology/datasheets/PEP.pdf>
2. M. V. Pikunov, The behavior of suspended impurities during crystallization. Non ferrous metals, their treatment and working (Moscow: Metallurgizdat, 1957), 56-67.
3. D. R. Uhlmann, B. Chalmers and K. A. Jackson, "Interaction between particles and a solid-liquid interface", J. Applied Physics, 35 (1964), 2986-2993
4. G. F. Bolling and J. Cisse, "A theory for the interaction of particles with a solidifying front", J. Crystal Growth, 10 (1971), 56-66.
5. A.W. Neumann, D.J. van Oss, J. Szekely, "Thermodynamics of Particle Engulfment", Kolloid Z.U.Z. polymere, 251 (1973), 415-423.
6. S.N. Omenyi, A.W. Neumann, "Thermodynamic Aspects of Particle Engulfment by Solidifying Melts", J. Appl. Phys, 47 (1976), 3956-3962..
7. A. A. Chernov, D. E. Temkin, S. M. Mel'nikova. "Theory of the capture of solid inclusions during the growth of crystals from the melt", Sov. Phys. Crystallogr., 21(4) (1976), 369-379..
8. J. Cisse and G. F., Bolling, "A theory for the interaction of particles with a solidifying front", J. of Crystal Growth, 10 (1971), 67-76.
9. C. E. Schvezov, "Interaction of particles with an advancing solid/liquid interface" Master of Applied Science Thesis. Department of Metals and Materials Engineering. UBC. Canadá.1983
10. C. E. Schvezov and F. Weinberg. Interaction of Particles with an Advancing Solid-Liquid Interface. 33rd. Canadian Metal Physics Conference. Kingston. Ontario. Canadá. Junio, 1983.
11. C. E. Schvezov and F. Weinberg. Interaction of Iron Particles with a Solid-Liquid Interface in Lead and Lead-Alloys. Met. Trans. 16B, (1985) pp 367-375. USA.
12. Y. Fasoyinu and C. E. Schvezov. F. Weinberg, "Interaction of ceramic particles with an advancing solid-liquid interface in aluminum based composites", Int. Sol. Proc. Pergamon, 1990, 243-252. .

13. A. Mitchel, A. Schmalz, C. E. Schvezov and S. Cockroft. International Symposium on Superalloys 718,625,706 and Derivatives. June 27-29,1994. Pittsburgh. Pennsylvania, USA.
14. O. Han and J. D. Hunt, Redistribution of Particles during Solidification, ISIJ International, Vol. 35 (1995), No. 6, pp. 693-699
15. Y. Hongbin, S. Hiroyuki, E. Toshihiko and S. Mikio, In-Situ Formation Observation of Collision. of Alumina Inclusion Agglomeration and Cluster Particles on Steel Melts, ISIJ International, Vol. 37 (1 997), No. 10, pp. 936-945
16. H. Shibata et al., "In-situ Observation of engulfment and pushing of nonmetallic inclusions in steel melt by advancing melt/solid interface", ISIJ International, 38 (1998), 149-156.
17. S. Mikio, Y. Ryuji, M. Katsuhiko and N. Masayuki, Inclusion Particle Growth during Solidification of Stainless Steel, ISIJ International, Vol. 41 (2001), No. 3, pp. 247-256
18. P. Diko , K. Zmorayová , N. Hari Babu , D.A. Cardwell, Shape change during solidification of bulk. single grain Y-Ba-Cu-O samples fabricated by top seeded melt growth. Physica C 398 (2003) 1-7
19. A. A. Chernov and D. E. Temkin 1976 Crystal Growth and Materials. Ed. by E. Kaldis and H. J. Sheel. (North Holland, Amsterdam, 1977) pp 3-77.
20. D.M. Stefanescu, B.K. Dhindaw , S.A. Kacar, A. Moitra. Behavior of ceramic particles at the solid/liquid metal interface in metal matrix composites. Metall Trans 1988;19A(11):2847-55.
21. R. Sasikumar, T.R. Ramamohan, B.C. Pai. Critical velocities for particle pushing by moving solidification fronts. Acta Metall 1989;37(7): 2085-91
22. J. Pötschke, V. Rogge . On the behaviour of foreign particles at an advancing solid-liquid interface. J Cryst Growth 1989;94(3):726-38.
23. P. Casses, M.A. Azouni,. A General theoretical approach to the behavior of foreign particles at advancing solid-liquid interfaces. Adv Colloid Interface Sci 1994;50:103-20.
24. M. Ode, J.S. Lee, T. Suzuki, S.G. Kim, W.T. Kim. Numerical simulation of interface shape around and insoluble particle for Fe-C alloys using phase field model. ISIJ Int 1999;39(2):149-53.
25. A.W. Rempel , M.G. Worster . The interaction between a particle and an advancing solidification front. J Cryst Growth 1999;205(3):427-40.
26. J.W. Garvin, H.S. Udaykumar. Particle-solidification front dynamics using a fully coupled approach. Part I. Methodology. J Cryst Growth 2003;252(1):451-66.
27. A.A. Chernov, D.E. Temkin, A.M. Mel'nikova. The influence of the thermal conductivity of a macroparticle on its capture by a crystal growing from a melt. Sov Phys Crystallogr 1977;22(6):656-8.
28. D. Shangguan, S. Ahuja, D.M. Stefanescu. An analytical model for the interaction between an insoluble particle and an advancing solid/liquid interface. Metall Trans 1992;23A(2):669-80.
29. S. Sen, B.K. Dhindaw, D. M. Stefanescu, A. Catalina, P.A. Curreri. Melt convection effects on the critical velocity of particle engulfment. J Cryst Growth 1997;173(3):574-84.
30. J.W. Garvin, H.S. Udaykumar, Particle-solidification front dynamics using a fully coupled approach, part II: comparison of drag expressions. Journal of Crystal Growth 252 (2003) 467-479

30. J.W. Garvin, H.S. Udaykumar, Particle-solidification front dynamics using a fully coupled approach, part II: comparison of drag expressions, *Journal of Crystal Growth* 252 (2003) 467–479
31. M. Kolbe, X.R. Liu, T. Volkman, R. Röstel, P.K. Galenko, G. Eggeler, B. Wei, D.M. Herlach. Interaction of solid ceramic particles with a dendritic solidification front, *Materials Science and Engineering A* 375–377 (2004) 524–527
32. J.W. Garvin, H.S. Udaykumar, Drag on a particle being pushed by a solidification front and its dependence on thermal conductivities, *Journal of Crystal Growth* 267 (2004) 724–737
33. J.W. Garvin, H.S. Udaykumar, Drag on a ceramic particle being pushed by a metallic solidification front, *Journal of Crystal Growth* 276 (2005) 275–280.
34. J.W. Garvin, Y. Yang, H.S. Udaykumar Multiscale modeling of particle-solidification front dynamics, Part I: Methodology, *International J. of Heat and Mass Transfer* 50 (2007) 2952–2968
35. J.W. Garvin, Y. Yang, H.S. Udaykumar “Multiscale modeling of particle-solidification front dynamics. Part II: Pushing-engulfment transition”, *International J. of Heat and Mass Transfer*, 50(2007), 2969–2980
36. M.S. Park, A.A. Golovin, S.H. Davis “The encapsulation of particles and bubbles by an advancing solidification front” *J. Fluid Mech.* (2006) Vol 560 pp. 415-436
37. J.C.T. Kao, A.A. Golovin, S.H. Davis, “Particle capture in binary solidification”, *J. Fluid Mech.* (2009) 625, pp 299-320
38. D.M. Stefanescu, F.R. Juretzko, B.K. Dhindaw, A. Catalina, S. Sen, and P.A. Curreri, “Particle Engulfment and Pushing by Solidifying Interfaces: Part II. Microgravity Experiments and Theoretical Analysis” *Metall. and Mater. Trans.* 29A, June 1998—1697
39. A.V. Catalina, S. Mukherjee, and D.M. Stefanescu, “A Dynamic Model for the Interaction between a Solid Particle and an Advancing Solid/Liquid Interface” *Metall. and Mater. Trans.* 31A (2000) 2559
40. M.A. Azouni, P. Casses P. Thermophysical properties effects on segregation during solidification. *Adv Colloid Interface Sci* 1998; 75(2):83–106.
41. K.V Sharp; R.J Adrian, Transition from laminar to turbulent flow in liquid filled microtubes, *Exp. Fluids* 38:1.
42. K Travis.; B Tood.; D. Evans, Departure from Navier–Stokes hydrodynamics in confined liquids, *Phys. Rev. E* 55,(1997), 4288.
43. R. L. Daugherty, A.C. Ingersoll. “Mecánica de los fluidos”; (1964), p.348.
44. C.E. Schvezov, Modelización dinámica de la interacción de partículas con interfaces sólido líquido durante la solidificación. *Anales de la SAM’98-IBEROMET V. Tomo I*. Pp. 57-60. 14-18 Septiembre 1998. Rosario. Argentina.
45. C.E. Schvezov, Dynamic Calculations for Particle Pushing. *Solidification 1999*. Edited by W. H. Hofmeister, J. R. Rogers, N. B. Singh, S. P. Marsh and P. W. Vorhes, pags. 251-261 . TMS (USA). 1999.
46. J. K. Kim and P. K. Rohatgi, The effect of the diffusion of solute between the particle and the interface on the particle pushing phenomena, *Acta mater.* Vol. 46, No. 4, pp. 1115-1123, 1998
47. A.M. Zubko, V.G. Lobanov, V.V. Nikonova. Reaction of foreign particles with a crystallization front. *Sov Phys Crystallogr* 1973; 18(2):239–41.
48. M.K. Surappa, P.K. Rohatgi. Heat Diffusivity criterion for the entrapment of particles by a moving solid–liquid interface. *J Mater Sci* 1981;16(2):562–4.

49. L. Hadji, A.M.J. Davis, "The influence of insoluble spherical particles on the stability of a planar solidifying interface", *Journal of Crystal Growth* Vol 191, Issue 4, 1 August 1998, Pages 889-896
50. L. Hadji, *Modelling and Asymptotic Analysis of Particle-Interface Interaction Mathematical and Computer Modelling* 36 (2002) 147-156
51. A.E. Corte "Vertical Migration of Particles in Front of a Moving Freezing Plane"; *J. of Geophysical Res.*, Vol 67(3) (1962), 1085-1090.
52. P. Hoekstra and D. R. Miller, "On the Mobility of Water Molecules in the transition Layer between Ice and a Solid Interface; *J. of Colloid. Interface Sci.*, 25, (1967), p. 166.
53. J. Cisse and G. F. Bolling, "The steady state rejection of insoluble particles by salol grown from the melt" *Journal of Crystal Growth* 11 (1971) 25-28
54. Ch. Körber - G. Rau y M.D. Cosman-E.G. Cravalho, "Interaction of Particles and a Moving Ice-liquid Interface"; *J. of Crystal Growth*, 72, (1985), p. 649.

Referencias del Capítulo 3. Objetivos

1. Schvezov, C. Modelización dinámica de la interacción de partículas con interfases sólido líquido durante la solidificación. *Anales de la SAM'98-IBEROMET V. Tomo I.* Pp. 57-60. 14-18 Septiembre 1998. Rosario. Argentina.
2. Schvezov, C. E. . *Dynamic Calculations for Particle Pushing. Solidification 1999.* Edited by W. H. Hofmeister, J. R. Rogers, N. B. Singh, S. P. Marsh and P. W. Vorhes, pags. 251-261 . TMS (USA). 1999.

Referencias del Capítulo 4. Formulación del modelo

1. S.C. Chapra, R.P. Canale *Numerical methods for engineers*, (McGraw-Hill) (2005).
2. G. F. Bolling and J. Cisse. "A theory for the interaction of particles with a solidifying front", *J. Crystal Growth*, 10 (1971), 56-66.
3. R. Sasikumar, T.R. Ramamohan, B.C. Pai. Critical velocities for particle pushing by moving solidification fronts. *Acta Metall* 1989;37(7): 2085-91
4. P. Casses, M.A. Azouni. A General theoretical approach to the behavior of foreign particles at advancing solid-liquid interfaces. *Adv Colloid Interface Sci* 1994;50:103-20.
5. A.W. Rempel, M.G. Worster. The interaction between a particle and an advancing solidification front. *J Cryst Growth* 1999;205(3):427-40.
6. D. Shaugguan, S. Ahuja, D.M. Stefanescu. An analytical model for the interaction between an insoluble particle and an advancing solid/liquid interface. *Metall Trans* 1992;23A(2):669-80
7. L. Hadji, A.M.J. Davis, "The influence of insoluble spherical particles on the stability of a planar solidifying interface", *Journal of Crystal Growth* Vol 191, Issue 4, 1 August 1998, Pages 889-896
8. L. Hadji, *Modelling and Asymptotic Analysis of Particle-Interface Interaction Mathematical and Computer Modelling* 36 (2002) 147-156

9. J. K. Kim and P. K. Rohatgi, The effect of the diffusion of solute between the particle and the interface on the particle pushing phenomena, *Acta mater.* Vol. 46, No. 4, pp. 1115-1123, 1998
10. A.M. Zubko, V.G. Lobanov, V.V. Nikonova. Reaction of foreign particles with a crystallization front. *Sov Phys Crystallogr* 1973; 18(2):239-41.
11. M.K. Surappa, P.K. Rohatgi. Heat Diffusivity criterion for the entrapment of particles by a moving solid-liquid interface. *J Mater Sci* 1981;16(2):562-4.
12. A. A. Chernov and D. E. Temkin 1976 *Crystal Growth and Materials*. Ed. by E. Kaldis and H. J. Sheel. (North Holland, Amsterdam, 1977) pp 3-77.
13. M.A. Azouni, P. Casses. Thermophysical properties effects on segregation during solidification. *Adv Colloid Interface Sci* 1998; 75(2):83-106.
14. K.V Sharp; R.J Adrian, Transition from laminar to turbulent flow in liquid filled microtubes, *Exp. Fluids* 38:1.
15. K Travis.; B Tood.; D. Evans, Departure from Navier-Stokes hydrodynamics in confined liquids, *Phys. Rev. E* 55,(1997), 4288.
16. R. L. Daugherty, A.C. Ingersoll. "Mecánica de los fluidos";(1964), p.348.

Referencias del Capítulo 5. Resultados

1. P. Casses, M.A. Azouni,. A General theoretical approach to the behavior of foreign particles at advancing solid-liquid interfaces. *Adv Colloid Interface Sci* 1994;50:103-20.
2. A.V. Catalina, S. Mukherjee, and D.M. Stefanescu, "A Dynamic Model for the Interaction between a Solid Particle and an Advancing Solid/Liquid Interface" *Metall. and Mater. Trans.* 31A (2000) 2559
3. J.W. Garvin, H.S. Udaykumar, Particle-solidification front dynamics using a fully coupled approach, part II: comparison of drag expressions, *Journal of Crystal Growth* 252 (2003) 467-479
4. J.W. Garvin, H.S. Udaykumar, Drag on a particle being pushed by a solidification front and its dependence on thermal conductivities, *Journal of Crystal Growth* 267 (2004) 724-737
5. J.W. Garvin, H.S. Udaykumar, Drag on a ceramic particle being pushed by a metallic solidification front. *Journal of Crystal Growth* 276 (2005) 275-280.
6. R. Auras. y C. Schvezov. "Estudio de las Estructuras de Solidificación en Materiales Compuestos de Al-Si y Al-Zn." *Actas de la Reunión de Comunicaciones Científicas y Técnicas de la UNNE*. Tomo IV, pág. 7-73 a 7-76. 1996. Resistencia. Argentina
7. A.E. Ares, S.F. Gueijman, C.E. Schvezov." An experimental investigation of the columnar-to-equiaxed grain transition in aluminum-copper hypoeutectic and eutectic alloys" *Journal of Crystal Growth* 312 (2010) 2154-2170

Referencias del Capítulo 6. Análisis y discusión

1. J. Cisse and G. F. Bolling, "The steady state rejection of insoluble particles by salol grown from the melt" *Journal of Crystal Growth* 11 (1971) 25-28
2. P. Hoekstra and D. R. Miller, "On the Mobility of Water Molecules in the transition Layer between Ice and a Solid Interface; *J. of Colloid. Interface Sci.*, 25, (1967), p. 166.

3. AE Corte "Vertical Migration of Particles in Front of a Moving Freezing Plane"; J. of Geophysical Res., Vol 67(3) (1962),1085-1090.
4. Ch. Körber - G. Rau y M.D. Cosman-E.G. Cravalho, "Interaction of Particles and a Moving Ice-liquid Interface"; J. of Crystal Growth, 72, (1985), p. 649.