### ESTUDIO MOVIMIENTO DE METAL LIQUIDO A VELOCIDADES MAYORES DE 1 M/S



### PhD THESIS

Author: Primitivo Carranza Torme Supervised by : Dr. Jesus M<sup>a</sup> Blanco Ilzarbe Energy Engineering Department Faculty of Engineering – Bilbao, Vizcaya University of Basque Country UPV / EHU

(cc)2022 PRIMITIVO CARRANZA TORMÉ (cc by 4.0)

### AGRADECIMIENTOS

Al difunto Francisco Javier Bilbao, Dr. Ingeniero Industrial y antiguo profesor de mecánica de fluidos de la E.I.B., y con quien se empezó esta tesis. Sin su ayuda no hubiera sido posible mi pasión por la mecánica de fluidos, ni esta tesis.

Al Dr. Rafael Pintos, antiguo profesor de metalurgia de la E.I.B. por que ha aportado muchas ideas y puntos de vista interesantes

Al Dr. José María Alcalde, antiguo Catedrático de mecánica de la E.I.B. porque siempre ha sabido encontrar la solución más practica a los problemas complejos.

Al Dr. Jesús María Blanco, profesor de Mecánica de Fluidos de la E.I.B. y ponente de esta tesis. Sin su empuje y constancia no hubiera sido posible la finalización de la misma.

A Don Francisco José Lara, Ingeniero industrial y CEO de la empresa Simulación y Proyectos S.L. que presto equipos, software y conocimiento de CFD (3D-Flow) para la verificación experimental de esta tesis.

Al Dr. J. Campbell por facilitarme valiosísima información sobre su trabajo y acceso a los datos de la British Metallurgical Association.

Y sobre todo a mi familia Bego, Begoña, María, Jon, María Rosa y Rafael, a los que he robado tanto tiempo de dedicación y por lo que les estaré eternamente agradecido.

### RESUMEN

La industria de la fundición es un sector que ha de mejorar un proceso de fabricación con muchos procesos físicos distintos, y en condiciones críticas. Esto implica muchas variables que hacen que el proceso se encarezca considerablemente, si se quieren controlar y automatizar. Por este motivo, se prefieren trasladar los procesos productivos a lugares donde el coste de la mano de obra sea más barato, para no abordar esas variables que requieren un gran conocimiento tecnológico.

Aun así, ha de asumirse cierta familia de defectos, que se contrarrestan con mayores tamaños de pieza como factor de seguridad. Lo cual incrementa los costes de fabricación y de su posterior mecanización.

Esta y otras razones han hecho que la tecnología de la fundición se base, en gran medida, en conocimiento empírico acumulado en la propia empresa o recogido en manuales de buenas prácticas del sector, con estilos muy alejados del mundo académico.

La introducción de software de cálculo de enfriamiento y llenado está permitiendo verificar y corregir esos manuales de buenas prácticas y entender el fenómeno físico que esconden. Pero el problema que conlleva es la necesidad de validación en condiciones reales, que significa metal fundido fluyendo a altas temperaturas. Lo cual hace que sea algo inviable en unas condiciones más o menos sostenibles.

Es por ello, por lo que aparecen de vez en cuando familias de defectos, que nos alertan de que seguimos sin controlar el 100% de los fenómenos físicos que ocurren en esos procesos tan extremos. Estos defectos hacen que la rentabilidad y la optimización de esta industria se vea mermada y haga que los inversores escojan caminos más fáciles.

En este trabajo de investigación identificaremos y validaremos un proceso físico poco conocido, y todavía no aceptado ampliamente en el sector, la teoría de Bifilm. Haremos evidente este fenómeno para el acero y lo sumaremos a lo ya estudiado sobre el aluminio. Con lo que podremos extrapolar esta teoría al resto de metales en estado líquido. Verificaremos que los CFDs no contemplan este fenómeno y que en algunas situaciones es interesante y posible las simulaciones con agua a escala 1:1 del proceso de llenado.

Los experimentos realizados y su verificación computacional nos han permitido adecuar los costes y tiempos de diseño para proponer esta metodología de verificación en piezas de gran tamaño y por tanto, de altos costes.

Y lo más importante, abrimos un campo de investigación no abordado hasta la fecha (que si bien fue detectado por los estudios del profesor Campbell) sobre lo que ocurre en metales en estado líquido (T<sup>a</sup> mayores de 1000°) moviéndose en régimen muy turbulento (velocidades mayores de 1 m/s) que implican Reynolds> 4000 (Campbell, 2013). En este trabajo se propone una idea del comportamiento de los metales líquidos diferente a lo que hasta ahora la metalurgia considera. Su descubrimiento llena un cambo

abandonado por la ciencia y que necesita de más experimentación para su parametrización.

# ABREVIATURAS

AEA	Autoridad de la Energía Atómica
BBGC	Bottom Boundary Gravity Current
CCD	Charge-Coupled Device
CFD	Computational Fluid Dynamics
CHAM	Concentration Heat and Momentum Ltd.
CMOS	Complementary Metal Oxide Semiconductor
DPM	Discrete Particle Model
E.I.B.	Escuela de ingeniería de Bilbao
EDL	Capa doble eléctrica
FAVOR	Fractional Area-Volume Obstacle Representation
FE	Rejilla de elementos finitos
FIC	Fluid in cell
FIDAP	Fluid Dynamics Analysis Package
FINE	Flow Integrated Environments
FLOW-3D	Software de simulacion de fluidos por CFD de la empresa Flow Science, Inc (USA)
FVM	Método de Volumen Finito
GMO	Objeto en movimiento general
GMRES	Generalized Minimal Residual Algorithm
Н	Horizontal
LANL	laboratorio nacional de Los Álamos
LL	Lagrange-Lagrange
MAC	Marker-and-Cell
MDF	métodos de diferencias finitas
MEF	elementos finitos
Mev	Mega Electron Voltio
MGC	Manual Gain Control
NASA	The National Aeronautics and Space Administration
PCOEF	coeficiente de partición
PDGC	Particle-Driven Gravity Currents
PDRG	Multiplier for coefficient of particle drag, which is a function of Reynolds number of the fluid flow around the particle.
PIC	number of the fluid flow around the particle.
PVC	Cloruro de polivinilo
RANS	Reynolds Averaged Navier Stokes
RHOFS	densidad de fase sólida
RNG	modelo de turbulencia
RX	Técnica radiográfica
	-

S	Mean strain time scale
TEUT	temperatura eutéctica
TFM	Two-Fluid Model
UE	Union Europea
V	Vertical
VOF	Técnica de Volumen de Fluido

# SIMBOLOS

Cmos	Complementary metal-oxide-semiconductor
$C_N$	Semejanza química
$C_p$	Calor especifico
$C_t$	Semejanza cinematica
d	Diámetro de la partícula
D	Diametro
Eu	Numero de Euler
Fg	Fuerza por gravedad
Fi	Fuerza inercial
Fp	Fuerza por la presion
Fr	Numero de Froude
Fu	Fuerzas viscosas
g	Gravedad
g'	Gravedad reducida
ĥ	Altura del tanque de agua
Η	Altuta
k	Conductividad termica
L	Longitud
М	Módulo de solidificación
Ν	Tasa de transporte de masa debido a la difusión
Ø	Diametro
Р	Presión del fluido
р	Presión media
r <sub>a</sub>	Densidad del fluido a T <sup>a</sup> ambiente
rd	Densidad del fluido fundido
Re	Numero de Reynolds
Rh	Rendimiento hidráulico
RX	Rayos X
S	Sección del conducto
t	Tiempo
Т	Temperatura
U	Velocidad
и	Velocidad del líquido fundido
<b>U</b> diff	Velocidad de difusión de la partícula
We	Numero de Weber
α	Difusividad termica
в	Coeficiente de arrastre.
$\Delta H$	Pérdidas de carga
η	Relación de la escala de tiempo turbulento

λ	Semejanza geométrica
μ	Viscosidad del fluido
ξ	Coeficientes de pérdida de carga
ρ	Densidad
σ	Tension superficial
Y	Viscosidad cinemática
$C_F$	Semejanza dinámica
$V_F$	fracción de volumen abierta al flujo
ρ R <sub>DIF</sub>	densidad del fluido
	difusión de la turbulencia
$R_{SOR}$ $r_m$	fuente
	radio de referencia fijo.
S <sub>c</sub>	número de Schmidt turbulento.
$\left(G_{x},G_{y},G_{z}\right)$	aceleraciones del cuerpo
$(f_x, f_y, f_z)$	aceleraciones viscosas
$(b_{y}, b_{y}, b_{z})$	pérdidas de flujo
CV	calor específico a volumen constante de fluido
$f_s$	fracción de solido
CLHT1	calor latente
<i>C</i> <sub>1</sub>	composiciones en fase líquida
<i>C</i> <sub>2</sub>	composiciones en fase sólida
Dı	coeficientes de difusión de masa en la fase líquida
$D_S$	coeficientes de difusión de masa en la fase sólida.
<i>TS</i> 1	temperaturas de solidus
TL1	temperaturas liquidus
C <sub>T</sub>	número de Prandtl

# ÍNDICE DE FIGURAS

Figura 1.1	Coste del precio de memoria y almacenamiento.	2
Figura 1.2	Proceso de vida del acero	4
Figura 1.3	Producción mundial de fundición 2016	5
Figura 1.4	Consumo de fundición por sectores	6
Figura 1.5	Productividad de la fundición europea 2016	6
Figura 1.6	Participación en los costes de reparación	7
Figura 2.1	Vistas de la pieza después de mecanizar	16
Figura 2.2	relación porcentual de los costes en la fundición de la pieza de estudio	17
Figura 2.3	Esquema de fabricación por 4 canales inferiores y 3 mazarotas en la parte superior	18
Figura 2.4	Esquema de fabricación por 2 canales directos y 3 mazarotas en la parte superior	19
Figura 2.5	Formación irregular de 3 m de una de estas lenguas en la parte superior. Ancho hasta 300 mm	20
Figura 2.6	Puntos de oxidación y arena en el extremo opuesto a la alimentación	21
Figura 2.7	Árbol de decisiones	23
Figura 2.8	Trayectoria de una partícula esférica en sistemas geométrica y dinámicamente semejantes	29
Figura 2.9	Típico proceso de llenado	30
Figura 2.10	Densidad del acero en función de la temperatura	32
Figura 2.11	Viscosidad dinámica en función de la temperatura	33
Figura 2.12	Viscosidad dinámica del mercurio a diferente temperatura	34
Figura 2.13	Viscosidades para el mercurio	34
Figura 2.14	Densidad del mercurio a diferentes temperaturas	35
Figura 2.15	Líneas que marcan la frontera del defecto	38
Figura 2.16	Los defectos que aparecen son importantes en tamaño	38
Figura 2.17	Defectos de arena. Su geometría se puede asimilar a una esfera irregular	39
Figura 2.18	Defectos de gas. Se puede observar cómo una esfera con algo de cola	40
Figura 2.19	RX de llenado de aluminio en proceso Disamatik	41
Figura 2.20	Tubo de RX conectado a un sensor CMOS para visualización digital	41
Figura 2.21	Pruebas con tubos de RX de micrófono	42
Figura 2.22	Pruebas de radiografiado de acero con aceleradores médicos y sensores	
	Cmos	42
Figura 2.23	Tipos de modelos en siderurgia	43
Figura 3.1	Análisis de sensibilidad CFD	53
Figura 3.2	Datos de la geometría de pieza	54
Figura 3.3	Celdas de control	54
Figura 3.4	Detalles del tamaño de las celdas en las diferentes partes del modelo	55
Figura 3.5	Densidad del acero en función de la temperatura	57
Figura 3.6	Conductividad térmica en función de la temperatura	58

Figura 3.7	Resultados de la simulación en probabilidad de defectos en superficie	50
Figura 3.8	Simulación fluidadinómica del acore liquida	59
Figura 3.0	Resultado de simulación en probabilidad de defectos debido a la	00
I Igula 5.7	solidificación	61
Figura 3.10	Resultado de la simulación en probabilidad de defectos debido a la	01
1.8.1.0.0110	solidificación	61
Figura 3.11	Zonas de contracción dirigida en mazarotas	62
Figura 3.12	Simulación fluidodinámica en acero con partículas	62
Figura 3.13	Posición de las partículas trazadoras al inicio de la simulación	63
Figura 3.14	Registro del recorrido de varias partículas	64
Figura 3.15	Simulación de arrastres	66
Figura 3.16	Medidas de defecto de pieza con situación de defectos y tamaño	66
Figura 3.17	Pruebas realizadas en taller con las sales en el primer modelo	67
Figura 3.18	En la simulación por CFD se verifica que el llenado es anterior a la	
-	solidificación en esta pieza	66
Figura 3.19	Modelo a escala 1:1 nuevo	69
Figura 3.20	Fotograma del video de llenado donde se ven las esferas de simulación	70
Figura 3.21	Esferas moviéndose en el fluido a medio llenado en el muñón	70
Figura 3.22	Primer prototipo de verificación de ensayos	71
Figura 3.23	Segundo prototipo y definitivo sistema de ensayo	71
Figura 3.24	Entrada del canal de alimentación	72
Figura 3.25	Alimentador de esferas	72
Figura 3.26	Depósitos de agua	73
Figura 3.27	Medidas de esferas	74
Figura 3.28	Sistema de recogida y bombeo de agua	75
Figura 3.29	Simulación con agua	75
Figura 3.30	Simulación CFD	76
Figura 3.31	Simulación con agua caso b)	76
Figura 3.32	Defectos en la pieza caso real b)	77
Figura 3.33	Figura 3.33 Detalle de zonas con velocidades mayores de 1 m/s	78
Figura 3.34	Simulación en agua	80
Figura 3.35	Defecto en la pieza real caso c)	81
Figura 3.36	Simulación en agua caso d)	84
Figura 3.37	Superposición de video y simulación CFD de las partículas	84
Figura 4.1	Posición de las arenas (20 mm diámetro)	90
Figura 4.2	Posición de las arenas	91
Figura 4.3	Diagrama de velocidades durante el llenado	93
Figura 4.4	Durante todo el proceso de llenado la zona de alimentación supera los 2	
	m/s	93
Figura 4.5	Creación de Bifilm	94
Figura 4.6	Forma de las burbujas Bifilm	94
Figura 4.7	Resultados del modelo de agua	95

Figura 4.8	Posicionamiento en superficie sobre la pieza real	95
Figura 5.1	Correspondencia entre llenado de una placa de aluminio (RX) y su	
	simulación en CFD	100
Figura 0.1	Alimentación típica de fundición	119
Figura 0.2	Coeficiente de perdidas por fricción por unidad de longitud y relativa al	
	diámetro hidráulico	121
Figura 0.3	Pie de colada recto	122
Figura 0.4	Pie de colada curvo	123
Figura 0.5	Canal curvo	123
Figura 0.6	Esquema de sistemas de llenado	125
Figura 0.7	Tabla de longitudes de ataque	125
Figura 0.8	Tabla de rendimiento hidráulico para H de 200 mm y unos diámetros	126
Figura 0.9	Ejemplo de cálculo de módulo de un paralepípedo	128
Figura 0.10	Ejemplo de descomposición de una pieza para calcular su módulo	129
Figura 0.11	Cálculo de módulos	130
Figura 0.12	Ejemplo para paralelepípedos	131
Figura 0.13	Crecimiento de un cristal de Fe-C en el proceso de solidificación	132
Figura 0.14	Dirección de solidificación de un canal de alimentación	132
Figura 0.15	Enfriadores laterales en molde. Enfriamiento según croquis de	
	fabricante	133
Figura 0.16	Tiempos de solidificación en función de los elementos exotérmicos	
	utilizados en combinación con el módulo	133
Figura 0.17	Formación de salpicadura	135
Figura 0.18	Típica unión fría en fundición	135
Figura 0.19	Microfotografía de zona Bifilm	136
Figura 0.20	Macrografía de un Bifilm, confundido históricamente con poros de fundición	136
Figura 0.21	Llenado lento de molde. Se superponen capas	137
Figura 0.22	El plegamiento a atrapado otros materiales	137
Figura 0.23	Generación de ola	138
Figura 0.24	Llenados de molde observados con técnicas radiográficas en Aluminio	138
Figura 0.25	Velocidades críticas de metales líquidos	139
Figura 0.26	Familia de defectos Bifilm	139
Figura 1.1	Generacion de carga entre la arena de moldeo y el metal	183
Figura 1.2	Vista del modelo viscoplastico mostrando la relación entre esfuerzos	
C	elásticos y viscosos	185
Figura 1.3	Celda computacional que muestra las ubicaciones de los componentes	
	del tensor de velocidad de deformación	188
Figura 1.4	Curva de rendimiento tipica (linea continua) y aproximacion de FLOW- 3D	196
Figura 1.5	Malla bidireccional	197
Figura 1.6	Volumen de celda	200
Figura 1.7	Esquema de la región de la interfaz en el modelo númerico	215
Figura 1.8	Interfaz de gas y líquido (1)	218
	Internet de Buo J. Induido (1)	<u> </u>

Figura 1.9	Interfaz de gas y líquido (2)	220
Figura 1.10	Curva de drenaje	224
Figura 1.11	Coordenadas inerciales y fijas en el cuerpo	228

# ÍNDICE DE TABLAS

Tabla 2.1	Características principales del proceso	16
Tabla 2.2	Aspectos más relevantes entre la semejanza dinámica y cinemática	28
Tabla 2.3	Algunos grupos adimensionales usados en el modelado de artesas	31
Tabla 2.4	Valores adimensionales normalizados con el acero	32
	Características del agua y el acero para los cálculos de los números	
Tabla 2.5	adimensionales	33
Tabla 3.1	Resultados de sensibilidad de malla	53
Tabla 3.2	Datos de características físicas en el software	56
Tabla 3.3	Variables del software	57
Tabla 3.4	Variables de simulación en software	59
Tabla 3.5	Tabla de materiales, diámetros y densidades de esferas	74
Tabla 3.6	Ensayos para determinar en qué momento se genera el defecto	78
Tabla 3.7	Toma de datos experimento 2	79
Tabla 3.8	Tabla experimento 3	82
Tabla 3.9	Tabla experimento 4	82
Tabla 3.10	Experimento 5	83
Tabla 4.1	Resultados	91

## **INDICE**

AGR	ADECIMIENTOS	VIII
<u>RESU</u>	JMEN	<u> </u>
ABRI	EVIATURAS	XIII
SIMB	OLOS	XVI
ÍNDIO	CE DE FIGURAS	XIX
ÍNDIO	CE DE TABLAS	XXIV
<u>1.</u>	INTRODUCCIÓN	1
1.1.	Producción mundial y repercusión económica	3
1.2.	ANTECEDENTES	7
1.3.	<b>Objetivos del estudio</b>	10
<u>2.</u>	PLANTEAMIENTO DEL PROBLEMA	15
2.1.	Introducción	15
2.2.	Pieza origen del problema	15
2.3.	Costes de producción	17
2.4.	GENERALIZACIÓN DEL PROBLEMA	18
2.5.	Metodología	21
2.5.1.	Estudio del proceso	21
2.5.2.	SEMEJANZAS EN EL MODELO DE LABORATORIO	22
2.5.3.	SEMEJANZAS A UTILIZAR EN EL EXPERIMENTO	29
2.5.4.	COMPARACIÓN CON CASO REAL Y LIMITACIONES DEL MODELO	36
2.5.5.	DEFINICIÓN DEL PROBLEMA	39
2.5.6.	VIABILIDAD PRÁCTICA Y ECONÓMICA	40
3.	CONSTRUCCION DEL MODELO NUMERICO Y VALIDACION N	MEDIANTE
	ENSAYOS EXPERIMENTALES	47
31	MODELO NUMÉRICO	47
311	FCUACIONES DE MOVIMIENTO DEL EL 11100	47
312	ECUACIONES DE MOVIMIENTO DE LAS PARTÍCULAS	49
313	MÉTODO DEL AIR-GAR-BRIEF USADO POR EL SOFTWARE C'ED FLOW 3D	51
3.2.	PARÁMETROS DE SIMULACIÓN FLOW-3D	52
321	ESTUDIO DE SENSIBILIDAD DE LA MALLA	52
3.2.2.	CONDICIONES DE CONTORNO	55
3.2.3.	SIMILACIÓN DE LLENADO	56
3.2.4	SIMULACIÓN DE SOLIDIFICACIÓN	58
3.3.	RESULTADOS	59
3.3.1.	RESULTADOS SIMULACIÓN DE LLENADO	59
3.3.2.	RESULTADOS SOLIDIFICACIÓN	60
3.3.3.	Partículas trazadoras	62
3.4.	DISEÑO DEL EXPERIMENTO	66
3.4.1.	DISEÑO PRELIMINAR	66
3.4.2.	DISEÑO DEFINITIVO	68
3.4.3.	Sistema de alimentación	71
3.4.4.	SELECCIÓN DE LAS PARTÍCULAS TRAZADORAS	73
3.5.	<b>R</b> ESULTADOS DEL MODELO	75
3.5.1.	Partículas de densidad = 1	75
3.5.2.	Partículas de densidad >1	76
3.5.3.	Partículas de densidad <1	79

3.5.4.	PARTÍCULAS MEZCLADAS	84
<u>4.</u>	RESULTADOS	88
4.1.	DIMENSION DEL EXPERIMENTO	88
4.1.1.	Modelo físico	88
4.1.2.	Modelo numérico	89
4.2.	ENSAYOS EN MODELO AGUA	89
4.3.	COMPARACIÓN ENTRE LOS ENSAYOS NUMÉRICOS Y EXPERIMENTALES	91
<u>5.</u>	CONCLUSIONES Y FUTUROS TRABAJOS	100
5.1.	Conclusiones	101
5.2.	TRABAJOS FUTUROS	104
<u>REFE</u>	CRENCIAS	106
BIBL	IOGRAFIA	110
ANEX	KO I MÉTODO EMPÍRICO	117
ANEX	KO II METODOS COMPUTACIONALES	143

# INTRODUCCION

### 1. INTRODUCCIÓN

Las piezas de metal fundido son fundamentales para todas las industrias. Pero en la fabricación de éstas, desde el material líquido hasta la forma final, requiere el control de varias variables al mismo tiempo, incluida la temperatura de fusión, la aleación, el moldeado, el vertido, la solidificación, etc. Todos estos aspectos deben ser llevados a cabo correctamente, ya que el error de uno solo hará que la fundición no cumpla con las especificaciones del cliente.

La fundición de metales es una actividad humana que se ha desarrollo desde su pasado ancestral (más de 5000 años) hasta convertirse en una ciencia de la ingeniería moderna, que abarca toda su complejidad con un flujo continuo de nuevos conceptos y soluciones.

En este trabajo, el estudio de la tecnología de fundición es un análisis mucho más amplio que los estudios separados de propiedades de los metales, los efectos de la aleación, el trabajo y el tratamiento térmico, flujo de fluidos o solidificación. En los procesos de fundición, las zonas de recirculación fuertes pueden atrapar aire, gases, partículas de arena del molde y otros defectos que afectan seriamente la calidad de las piezas fundidas. Especialmente durante el llenado de superficies grandes, donde estos defectos son responsables de considerables pérdidas económicas. (HURST, 1996)

Comenzamos este estudio tomando como base el conocimiento de la teoría y la práctica del diseño de sistemas de llenado y alimentación para piezas fundidas (Sigworth, 2018). Estas técnicas han demostrado ser eficaces tanto para fines de diagnóstico, es decir, solución de problemas, mejora y optimización de procesos, así como en el desarrollo de nuevas tecnologías.

La aplicación de estas técnicas de simulación a los problemas específicos en el procesamiento de metales, no usan un tratamiento uniforme que defina claramente pasos a seguir donde las velocidades del metal líquido son mayores a 1 m/s. Estas son las piezas objeto de nuestro estudio.

Desde la década de 1980, ha habido un profundo cambio tecnológico en el campo de metales y materiales, impulsado por fuertes presiones competitivas (competencia entre las economías nacionales y entre diferentes materiales -como acero versus aluminio o aluminio versus plásticos o materiales compuestos- entre otros factores) (Steel statistic year book, 2019).En cualquier caso, se reconoce que, para asegurar la rentabilidad, es esencial actualizar y optimizar continuamente las operaciones de procesamiento de metales existentes, y quizás lo más importante, desarrollar continuamente nuevos productos y procesos de fabricación y simulación.

Para las economías nacionales significa que, utilizando la tecnología actual, no se puede justificar la construcción de nuevas plantas de producción de metales en la mayoría de los países occidentales, por lo que un esfuerzo en investigación y desarrollo podría mejorar las operaciones existentes. Y lo que es más importante, desarrollar nuevos conceptos de producto y proceso, sería crucial para el bienestar continuo de estas industrias y para la sociedad en su conjunto. La alta tasa de producción específica, la automatización y la robotización deberían ser componentes clave de tales esfuerzos.

Claramente, el tiempo de implantación de estos desarrollos tendrá que ser bastante corto, de modo que las técnicas tradicionales tendrán que ceder paso a enfoques alternativos, más rápidos y rentables. Se cree que los modelos matemáticos y, en mayor medida, los enfoques de modelado computacional tienen un gran potencial para ayudar a la realización de este cambio tecnológico tan necesario. (Study on the Copetitiveness of the European Steel Sector, 2008)

El impulso por la necesidad de un cambio tecnológico necesita también un fuerte impulso por la disponibilidad más efectiva en cuanto a los costos de las herramientas computacionales, que incluyen no solo el hardware sino también los diversos paquetes de software y de simulación física.



Figura 1.1 Coste del precio de memoria y almacenamiento. (Alexander, 2016)

Como se ilustra en la Figura 1.1, el costo de realizar un solo cálculo con un ordenador ha disminuido a lo largo del tiempo, y podemos esperar que esta tendencia continúe. De esto se desprende que, la simulación matemática se convertirá en un componente progresivamente más rentable, de hecho indispensable, en el de desarrollo de procesos.

Los modelos numéricos se han desarrollado para diversas aplicaciones de la ciencia e ingeniería, evolucionando desde métodos de diferencias finitas (MDF) y elementos finitos (MEF, desde 1950 al presente) donde las propiedades de los materiales, estudio de cargas estáticas, dinámicas, etc. han sido resueltas. Con los años, los investigadores han desarrollado modelos numéricos que describen el flujo líquido y

sólido en diferentes niveles de detalle y en diferentes condiciones de trasferencia de masa, calor y dinámica de fluidos. Encontrando en los modelos numéricos de CFD la respuesta para su análisis.

En este trabajo de investigación se presenta un enfoque practico-numéricoexperimental, simulando con precisión las condiciones de flujo dentro del molde y mostrando el potencial para predecir algunos defectos de fundición sobre un tipo particular de piezas fundidas. El enfoque numérico se construye a través de un paquete comercial, consistente en un simulador de dinámica de fluidos computacional (CFD) llamado Flow-3D. Este modelo trata las partículas como entidades discretas, que pueden colisionar, fusionarse, romperse, comprimirse y expandir; dentro de un volumen de control con unas condiciones de contorno. Este se compara con un modelo experimental simplificado, permitiendo obtener conclusiones sobre los defectos presentes en el proceso de fundición de piezas de gran tamaño, para así mejorar dicho proceso.

### 1.1. PRODUCCIÓN MUNDIAL Y REPERCUSIÓN ECONÓMICA

Desde la década de 1980, la industria siderúrgica de la UE se ha reorientado, de métodos de proceso y de producto, hacia una industria orientada al mercado. Esta evolución es el resultado de un esfuerzo de reestructuración que se caracteriza por la consolidación y el cierre de ineficientes y obsoletas plantas, así como por la inversión selectiva en las nuevas tecnologías. Durante esta transformación de procesos (a menudo acompañada por la privatización de las plantas de propiedad estatal) la industria tiende a ser más intensiva en capital y la productividad del trabajo ha aumentado considerablemente, especialmente en los nuevos Estados miembros. Los sectores de tubos de acero y subsectores de fundición siguen diferentes trayectorias, debido a que siempre han sido de propiedad privada y menos propensa a intervención del estado (Ernest&Joung, 2016).



Figura 1.2 Proceso de vida del acero. (European steel association, 2016)

Dentro de los mercados nacionales de la UE, se han enfocado sobre todo en los segmentos de gama alta. Se han centrado en productos de alta calidad, mucha innovación de producto y la creación de valor, con el apoyo de tecnología, la eficiencia y la mano de obra cualificada. La industria siderúrgica de la UE está dominada por grandes empresas multinacionales, mientras que las empresas de fundición de acero siguen siendo empresas pequeñas y medianas muy especializadas.

El sector del acero en general se enfrenta a grandes desafíos, especialmente en términos de costes y acceso a las materias primas y la energía, que tienen un grave impacto en la industria. Por otra parte, la creciente capacidad, la producción y la competitividad internacional fuera de la UE constituyen una amenaza, por lo que la cuota de mercado se está perdiendo hacia países como China, la India y Brasil. Además, la industria siderúrgica de la UE es vulnerable al endurecimiento de las políticas de medio ambiente.



Figura 1.3 Producción mundial de fundición 2016 (European steel association, 2016)

Mientras que la industria siderúrgica de la UE está estructurada para producir y entregar todos los tipos y calidades de productos de acero, su competitividad está vinculada principalmente a la alta calidad y a menudo al "producto a medida" en exigentes segmentos de usuarios finales. En consecuencia, la industria siderúrgica de la UE y su posición competitiva está fuertemente vinculada a la innovación de productos y la creación de valor agregado, apoyado por el desarrollo tecnológico avanzado. La mejora de la productividad es vital para este sector, especialmente en la pequeña y mediana empresa.

5



Figura 1.4 Consumo de fundición por sectores (Asociacion Española de Fundidores, 2016)



Figura 1.5 Productividad de la fundición europea 2016. (Steel European association, 2016)

Esta productividad en la fundición de metales está muy influenciada por los métodos productivos, pero, sobre todo, por la producción de defectos. Estos defectos, casi siempre son debidos a un mal diseño de la pieza que conlleva unos costes de reparación o de reprocesamiento muy altos.



### % MACRO INCLUSION IN CARBON AND ALLOW STEEL

Figura 1.6 Participación en los costes de reparación. (European Foundry Association, 2010)

Esta es la razón por la que un buen diseño necesita de técnicas cada vez más avanzadas de simulación por ordenador y por métodos no destructivos que evite su aparición.

#### **1.2.** ANTECEDENTES

Con anterioridad a 1960 las computadoras eran incapaces de resolver las ecuaciones de flujo ya que no disponían de capacidad computacional. El software necesitaba de muchas iteraciones que el hardware no podía hacer en un tiempo razonable.

Esto motivo que siempre la teoría del análisis adimensional, junto con la experimentación se utilizaran en paralelo para verificar todos los estudios teóricos. Además, los estudios teóricos necesitaban de grandes simplificaciones para poder obtener en un tiempo razonable unos resultados comparables, lo cual llevaba a errores importantes. Todo esto cambio con las recientes técnicas de CFD que han permitido usar en la industria estas herramientas con un gasto de tiempo y dinero razonables.

Hoy en día el análisis de flujo turbulento es el campo de esta ciencia donde se centran los técnicos y científicos. El estudio de la capa limite, o la de cortadura sigue siendo un área de su campo especifico. Su correcta modelización matemática sigue siendo un área muy extensa de estudio de las técnicas de CFD y de las diferentes marcas comerciales de software

En la década de los años treinta y cuarenta se realizan los mayores avances teóricos en modelización debido a la intensa actividad velica:

- 1931. El primero en introducir el concepto de longitud de mezcla fue Ludwig Prandtl (Prandtl, 1931) en su definición de capa limite. Con ello construyo las ecuaciones de capa límite para su modelización.
- 1940. Años más tarde, Theodore von Kármán (Kármán & Biot, 1940) estudió el desprendimiento de vórtices en las estelas de los cuerpos en su flujo externo.
- 1935. Geoffrey Ingram Taylor (Taylor, 1935) avanza con la utilización de modelos estadísticos para el estudio de la turbulencia. Sus trabajos y estudios serán la base para el
- 1933. Andréi Nikoláyevich Kolmogórov (Kolmogórov, 1933) desarrolla la teoría de las escalas de turbulencia y en la que se definía el concepto del espectro universal de energía de la turbulencia y de la cascada de energía.

Otro de los primeros en experimentar con CFD y desarrollar las primeras soluciones es Lewis Fry Richardson (Richardson, 1932). Él fue el primero en utilizar un modelo numérico para la meteorología. El sistema describía el espacio dividiéndolo en celdas y empleando un sencillo método por diferencias finitas para su resolución. Era muy curioso ver salas repletas de gente para poder calcular manualmente estos cálculos. Estas personas armadas con calculadoras realizaban dos mil operaciones por semana. Aunque de manera muy primitiva, estos fueron los comienzos de los cálculos fotodinámicos. Su libro Weather Prediction by Numerical Process sentaron las bases para la CFD moderna, aunque sus predicciones no fueran muy acertadas.

El laboratorio nacional de Los Álamos (LANL), financiado por la NASA, se encargó de desarrollar las técnicas de CFD con la intención de desarrollar los aviones supersónicos y los viajes espaciales en la década de los cincuenta y sesenta. Muchos de los métodos que se emplean en la actualidad en programas comerciales provienen de aquellos trabajos. Las instalaciones de los Alamos contaban con las computadoras más potentes del momento en el mundo. Uno de los primeros trabajos desarrollados con estas técnicas fue en energía nuclear para la creación de la bomba atómica con el MANIAC (1952) que realizó los cálculos. (Fernandez, 2012). Métodos como el Particle-in-Cell (PIC), el Fluid-in-Cell (FIC), los "vorticity-stream function methods" o el Marker-and-Cell (MAC) fueron desarrollados en las instalaciones de El LANL.

En 1963 Fromm y Harlow realizan por primera vez la simulación por computador del desprendimiento no estacionario de vórtices, retomando antiguos trabajos para el estudio del desprendimiento de vórtices alrededor de cilindros, (Harlow, 1964).

Los primeros métodos para simular flujos incompresibles empleaban códigos basados en la verticidad y la función de corriente. En la década de los años sesenta se consiguen implementar las primeras simulaciones en términos de velocidad y presión. Harlow y Welch (Francis H. Harlow, 1965) trabajaron en el desarrollo del método MAC como precursor del actual mallado "staggered mesh" que esta implementado en la actualidad en la mayoría de los softwares por volúmenes finitos.

Brian Spalding y su equipo del Imperial College de Londres en la década de los setenta, partiendo de los trabajos del LANL, Patankar y Spalding (Spalding, 1972) desarrollan una metodología basada en el "up wind differencing", en términos de velocidad y presión, en la que introducen por primera vez el método de acoplamiento SIMPLE.

Esta metodología tiene una clara ventaja frente a los métodos explícitos al garantizar siempre la estabilidad numérica, pues no presentan restricciones en la discretización temporal. Mas tarde se mejorará este método de acoplamiento dando lugar a los métodos SIMPLER (1980), SIMPLEC (1984) o PISO (1986). Además, en 1972, el propio Spalding, en colaboración con Launder (1972) (Fernandez, 2012), universaliza el modelo de turbulencia k-e. Este método es el más empleado en la actualidad, por ser el más robusto de entre todos los existentes.

Suhas V. Patankar (Patankar, 1980) y el Imperial College crean la base del método de volúmenes finitos y publican el primer gran libro que trata con gran detalle las metodologías de CFD. Este es el comienzo de la universalización de los métodos de CFD. Es a partir de esta época cuando las grandes empresas aeronáuticas comienzan a emplear códigos tridimensionales de flujo incompresible.

En 1980, Concentration Heat and Momentum Ltd presenta el primer software de propósito general denominado PHOENICS. Cuando fue lanzado al mercado, este software permitía modelizar dominios discretizados con celdas estructuradas, analizar flujos estacionarios y no estacionarios, compresibles e incompresibles, laminares y turbulentos e incluso podían modelarse reacciones químicas y flujos de una o dos fases. Fue una proeza de la ingeniería en aquellos años.

En 1983 un grupo de investigadores de la Universidad de Sheffield, en Inglaterra, desarrollaron un nuevo software comercial de tipo generalista, llamado FLUENT. Su código contaba también con discretizaciones estructuradas únicamente para flujo estacionario, con posibilidad de modelizar flujos laminares y turbulentos, y sobre todo la transferencia de calor, fenómenos de combustión.

En 1991 se desarrolla el código solver Rampant para crear mallas tetraédricas Tgrid, debido a que uno de los mayores problemas que se tenía era el uso de mallas estructuradas, que limitaban la discretización de geometrías complejas. así se creó el primer software de propósito general que resolvía mallas no estructuradas, y que estaba pensado para aplicaciones aeroespaciales de flujo compresible.

En la década de los ochenta y noventa se produce una explosión de empresas de software entre los cabe destacar a

- FIDAP (Fluid Dynamics Analysis Package), desarrollado a partir de los trabajos del Illinois Institute of Technology al mismo tiempo que FLUENT y luego integrado en el
- STAR-CD desarrollado como spin-off de los trabajos del Imperial Collage y centrado en mallas móviles no estructuradas
- FLOW3D creado por la Autoridad de la Energía Atómica (AEA) en Inglaterra para aplicaciones nucleares
- FLOW-3D (diferente al anterior) surgido del LANL para comercializar su potente software de flujos con superficie libre (SOLA-VOF).
- TASC flow, desarrollado en Canadá y posteriormente fusionado con el FLOW3D de la AEA para dar lugar al CFX-4.
- FINE (Flow Integrated Environments), desarrollados por NUMECA. (Fernandez, 2012)

En los años siguientes de la década de los noventa, las diferentes empresas surgidas para comercializar estos softwares se han fusionado o absorbido, dando lugar a grandes monstruos de compañías de cálculo. Esto a su vez a generado la aparición de software de código libre como OpenCFD, que desarrolla actualmente un avanzado solver denominado OpenFOAM. (Fernandez, 2012)

En nuestro estudio hemos utilizado el software de FLOW-3D por varias razones que pueden parecer prosaicas, pero que en la práctica, son de importancia vital en la implantación de cualquier proyecto. La disposición del recurso en coste y plazo, así como el soporte técnico, han sido decisivos a la hora de seleccionar la herramienta.

Nuestra experiencia anterior en el uso de este software en la empresa, donde hemos podido validar con cientos de simulaciones los resultados obtenidos, son la mejor prueba de la solvencia de la herramienta.

### **1.3. OBJETIVOS DEL ESTUDIO**

El haber sufrido personalmente los efectos de la aparición de defectos sin causa aparente y sus consecuencias, como la pérdida económica o perdidas de contratos, hace pensar en dar un enfoque práctico al estudio para ser útil al ingeniero diseñador. Al no poder encontrar respuestas recogidas en los manuales de buenas prácticas, ninguna explicación entre los expertos consultados, y las lagunas de la teoría al respecto, me decidía estudiar en profundidad el tema para desarrollar una metodología nueva de diseño y así evitar una familia de defectos que aparecen a velocidad >1m/s.

Por eso divido los objetivos en dos tipos: Los generales, cuyo interés es entender qué pasa en el proceso físico y métodos para poder simularlo. Y específicos, que son reglas para eliminar su aparición y una metodología práctica para desarrollar modelos y/o prototipos que ayuden al diseñador en su trabajo y bajen los costes actuales en fabricación.

# **Objetivos generales:**

- a) A nivel teórico poder explicar el proceso físico que se produce en piezas donde un eje es mucho mayor a los otros.
- b) A nivel teórico poder explicar el proceso físico que se produce en piezas donde las velocidades de alimentación son mayores a 1 m/s y que la sabiduría de taller ponía como barrera.
- c) Eliminar defectos en fundiciones de gran tamaño mediante la predicción por simulación.
- d) Validar la simulación con agua a escala 1:1 de metal fundido antes de solidificar.
- e) Demostrar que el comportamiento de partículas esféricas de diferentes densidades en este fluido se correlaciona con la simulación de partículas sin masa de los softwares CFD y los defectos en pieza.

## **Objetivos específicos:**

- f) Encontrar donde la simulación CFD no cubre esta área de defectología.
- g) Construcción de modelos a escala 1:1 donde se pueda simular con agua el proceso real en taller.
- h) Validación de resultados experimentales en medio acuoso para verificar lo que ocurre en el metal líquido:
- i) Bajar coste de proceso de fundición por el uso de simulación previa en medio acuoso
## PLANTEAMIENTO DEL PROBLEMA

## 2. PLANTEAMIENTO DEL PROBLEMA

## 2.1. INTRODUCCIÓN

Los procesos de fundición de grandes piezas son un área particular dentro del mismo sector de la fundición. Esta área es muy especializada por una serie de características que lo diferencian de otros procesos, dentro de los cuales podemos describir:

- las piezas no son de producción continua en comparación con piezas de menor tamaño que sí pueden llegar a ser de producción continua;
- las dimensiones de las fundiciones que se tratan en esta tesis son piezas que su orden de magnitud esta medido en metros y en Tm
- otra característica es que, por las dimensiones, los procesos de fundición han sido desarrollados de forma empírica y varias industrias han probado métodos diversos, los cuales hoy en día se pueden generalizar en varios tipos ya probados y establecidos que se describen como parte del marco teórico. Nosotros nos centraremos en el método alemán que es el que más ampliamente se han usado en nuestra zona geográfica del País Vasco
- Otro de los factores que hace de estos tipos de fundiciones diferentes es el costo de los ensayos, donde la curva de aprendizaje es significativamente costosa. Un proceso con el método incorrecto y no controlado implica altos costos de prueba y error antes de llegar a la pieza deseada.

El objetivo de esta tesis es presentarse como otra parte del avance de los programas de diseño y simulación que, mediante métodos de ensayos con materiales simples, permitan predecir los defectos del molde antes de fundir el acero. Logrando así un mejor producto final, con menor costo de producción dentro de un mercado muy especializado y de alta gama.

## 2.2. PIEZA ORIGEN DEL PROBLEMA

La pieza modelo para representar la totalidad de las condiciones de fundido de grandes piezas de acero, es una pieza con un eje mucho mayor al resto. Está constituida por un eje de longitud superior a los 5 metros, medidos de forma lineal, con un peso típico de alrededor de las 4 toneladas métricas, como se muestra en la Figura 2.1

Entre las características de estas destacamos las siguientes:

Material:	Acero al 0,2 % C
Longitud total.	6 m (media de 5 m)

Peso típico:	4 Tm	
Sección trasversal	no mayor a 40 x 20 cm	]
Alimentación	por sección lateral pequeña.	
Definiendo los	Solidificación de piezas con elevadas velocidades de llenado	>1m/s
parámetros de la fundición dentro de:	Simulación del proceso de llenado cuando uno de los ejes es mayor que los otros dos	50 a 1
El proceso de	Métodos empíricos	
fabricación de la pieza se modela por dos metodologías diferentes:	Métodos computacionales CFD	software "Flow 3D"
	Ferrodinámica del fluido	Temperatura, Viscosidad
Datos necesarios para conocer el comportamiento del fluido en el tiempo	Térmicas del fluido	Conductividad, Densidad, Calor especifico, Fracción solido líquido, Grafica liquido-solido, Calor latente
	Térmicas del molde	Conductividad, Densidad, Calor especifico, Rugosidad, Temperatura

Tabla 2.1 Características principales del proceso



Figura 2.1 Vistas de la pieza después de mecanizar

En resumen, la selección de esta pieza como representación del universo de piezas de gran tamaño, su relación de secciones trasversales, sus características físicas y las

características del proceso de fundición; nos permite poder comparar el método empírico y el método computacional, para evaluar las diferencias entre ambos.

#### 2.3. COSTES DE PRODUCCIÓN

Una de las principales razones para seleccionar esta rama de la industria de la fundición es el valor económico de producción de estas piezas y el impacto de los defectos en ese precio. Estos costes derivan del diseño del molde, las características del proceso de fundición en sí, la selección de los canales de colada, las rebabas generadas y el desmoldeo entre otros factores, que como se ve en el grafico Figura 2.2. Estos costes provienen de nuestros propios costes de producción en planta los extrapolables a otras fundiciones. Estos costes se obtuvieron de la experiencia de muchos años en la producción de una empresa muy competitiva a nivel internacional y con un control de costes interno muy férreo.



Figura 2.2 relación porcentual de los costes en la fundición de la pieza de estudio

Como se evidencia claramente, uno de los principales factores en el costo es la fabricación del molde y posterior rebaba. Como representación de las piezas fundidas de gran tamaño es una foto de la distribución real de los costes en este negocio.

Dado que queríamos bajar los costes y tiempos de producción, se decidió reducir el número y longitud de los canales de alimentación. Suponíamos que eso nos reduciría costes al reducir horas de preparación de molde, horas de corte y rebaba.

## 2.4. GENERALIZACIÓN DEL PROBLEMA

Para verificar la diferencia entre los procesos de CFD y los modelos empíricos de fundición, analizamos los problemas ocurridos en el moldeo de unas piezas importantes en las cuales solo se cambió el criterio de velocidad de fluido en la alimentación.

Se fundieron 12 piezas según el criterio tipo de alimentación con velocidad menor de 1 m/s (Tipo A, Figura 2.3) que ponen de límite los modelos empíricos tradicionales. Todas ellas resultaron sin defectos y cumplían la especificación del cliente. Como el tiempo de llenado ha de ser el mismo para evitar la solidificación de la pieza antes de su llenado (aparecen otras familias de defectos) se ideó otro tipo de alimentación lateral. En él no se tuvo en cuenta la regla empírica de velocidad máxima no mayor de 1 m/s. Tras el cambio de diseño (tipo B, Figura 2.4) se fundieron el mismo número de piezas según este nuevo criterio. El resultado fue que aparecieron estos nuevos defectos tan específicos y repetitivos.

• Proceso Pieza Tipo A

Con esta restricción, tanto los modelos de CFD como los modelos empíricos dan resultados similares y piezas sin defectos.

Para la pieza de estudio en el método empírico se utilizó la alimentación por la parte inferior mediante 4 canales de alimentación y 3 mazarotas, bajo las siguientes condiciones:

Se sigue la recomendación de velocidades menores de 1 m/s. En nuestro caso se diseñaron canales de alimentación y diámetro de estos para obtener una velocidad de 0,5 m/s.

- Muñón
- 1. Régimen pseudo laminar

Figura 2.3 Esquema de fabricación por 4 canales inferiores y 3 mazarotas en la parte superior

• Proceso Pieza Tipo B

Se considera un sistema de alimentación por 2 canales directos y las 3 mazarotas superiores. El tamaño de las mazarotas es el mismo ya que están relacionadas con el gradiente térmico y no con la velocidad de llenado.



Figura 2.4 Esquema de fabricación por 2 canales directos y 3 mazarotas en la parte superior

Los métodos tradicionales de moldeo desaconsejan este tipo de alimentación. ya que originan unos defectos muy grandes y no parametrizables. En nuestro caso sobre la superficie superior y muñón contrario a alimentación, como se muestra en las figuras Figura 2.5 y Figura 2.6.



Figura 2.5 Formación irregular de 3 m de una de estas lenguas en la parte superior. Ancho hasta 300 mm

En los procesos industriales se busca que el llenado del molde con metal líquido sea siempre muy rápido para que el proceso de solidificación empiece más tarde. Con esto se consigue que la solidificación inicie la cristalización sin problemas ni obstáculos. Para ello el metal liquido es introducido a casi 1600 °C en el molde y con lo que se asegura que no habrá ninguna zona solidificando antes de lo previsto.

Esto también nos ayuda a separar en los estudios de simulación, el proceso físico de llenado y el de solidificación. Aunque ambos estén físicamente relacionados, estas velocidades de llenado a esas temperaturas nos permiten independizar el proceso. (Ohno, Solidification: The Separation Theory and its Practical Applications, 1987)



Figura 2.6 Puntos de oxidación y arena en el extremo opuesto a la alimentación

#### 2.5. METODOLOGÍA

## **2.5.1.** ESTUDIO DEL PROCESO

Este estudio se realiza sobre unas piezas de longitud muy grande (4 a 6 m) con sección comparativamente pequeña y que nos permite estudiar el comportamiento fluidodinámico de las partículas de acero con gran nitidez y a gran velocidad (mayores de 1 m/s) tal y como se mostró en la Figura 2.1

Se evidencia que con velocidades de fluido metálico fundido superiores a 1 m/s se producen otros procesos fisicoquímicos que coinciden con los descritos por Champbell (Campbell, 2013)en su teoría de Bifilm, y que los softwares actuales de CFD no son capaces de determinar dando resultados muy distintos a la realidad.

Existe una problemática importante en la visualización del comportamiento de fluidos de materiales, con temperaturas por encima de los 1000°C en forma líquida. Este problema es el que surge en las fundiciones de acero y otras, donde nunca se baja de 1500°C para producir piezas fundidas en moldes. Estas temperaturas son necesarias para que el metal esté completamente líquido y pueda llenar todos los recovecos de la pieza diseñada, pero a su vez, impiden el uso de técnicas de observación directa.

Dado que en el proceso de llenado y solidificación se producen fenómenos físicos y químicos de gran importancia, es necesario la visualización de dicho proceso mediante alguna herramienta.

Hasta la aparición de la simulación y la visualización informática, no se habían conseguido grandes logros en este campo, al no poder contrastar los procesos intermedios en el llenado. Todo el conocimiento que se tenía era empírico y por método indirecto, analizando los defectos que aparecían con posterioridad. La aparición de la simulación computacional de CFD nos ayuda a resolver esta situación en parte y a validar algunos procesos intermedios como el enfriamiento y el flujo turbulento de llenado en el molde por el metal líquido hasta velocidades pequeñas.

Pero siguen apareciendo defectos en las piezas que los modelos actuales de CFD no han conseguido simular, por lo que es necesario incorporar correcciones en sus ecuaciones para conseguir modelos cada vez más fiables.

Veremos las diferencias de correlación de defectos en las simulaciones con CFD (Crepeau, 2011), en nuestro experimento lo realizaremos con el software comercial Flow-3D. Las simulaciones se realizarán usando como fluido agua a escala 1:1 y mediante los dos modos de alimentación diferentes, que implican 2 flujos turbulentos distintos.

## **2.5.2.** SEMEJANZAS EN EL MODELO DE LABORATORIO

La elección de modelo en un proceso de fundición conlleva una serie de decisiones a tomar tal y como se representa en la Figura 2.7



Figura 2.7 Árbol de decisiones (Dipak Mazumdar, 2010)

En nuestro experimento, la primera decisión fue decidir entre realizar un modelo a alta temperatura o un modelo frio (a temperatura ambiente). Como ya explicamos anteriormente, la necesidad de observar lo que ocurre en el fluido de manera visual nos empuja a buscar un modelo a temperaturas que permitan el manejo de instrumentos más accesibles y acercarse al modelo sin peligro. Por eso el modelo frío es la única posibilidad.

La siguiente decisión fue si hacerlo con agua ó con mercurio. En nuestro caso, dada la necesidad de observar el flujo y ver cómo se comporta colocando objetos trazadores en el mismo, necesitamos el agua como única posibilidad. La opacidad del mercurio lo invalida para el experimento, aparte claro está de las dificultades añadidas que supondrían su peligrosidad en el manejo, así como su precio y limitada disponibilidad. (datos de mercurio en la Figura 2.12)

Después de esta serie de decisiones, nos queda demostrar cómo un modelo de agua puede sustituir al acero en los procesos que queremos estudiar.

Los procesos de modelado de fluidos a tan altas temperaturas han de conseguir cuatro tipos de semejanza, según el proceso físico a estudiar (Dipak Mazumdar, 2010). Tenemos la semejanza geométrica, semejanza mecánica, semejanza térmica y semejanza química.

#### 1. Semejanza geométrica.

$$\frac{Medida_{modelo}}{Medida_{real}} = \lambda$$

Ecuación 1

La semejanza geométrica se basa en la similitud de formas. Se dice que dos cuerpos son geométricamente similares cuando, para cada punto en un cuerpo, existe un correspondiente en el otro cuerpo. Tal correspondencia geométrica de punto a punto normalmente permite una única dimensión lineal característica que se utilizará para representar el tamaño del modelo y prototipo

Se debe buscar el factor de escala de manera que el flujo en el modelo sea el mismo que en el real. Dependiendo del fenómeno estudiado, puede no ser necesario que se cumpla la semejanza geométrica como en el de flotación de escorias (Dipak Mazumdar, 2010). Además, con grandes flujos turbulentos, es necesario que ese factor de escala sea lo más grande posible, con lo que se aconseja en experimentación factores iguales a 1 (Julian Szekely, 1989). Dando lugar a número de Reynolds y el número de Froude iguales en modelo y en prototipo. (Julian Szekely, 1989).

#### 2. Semejanza química.

La semejanza química es imposible de conseguir en modelos fríos (T<sup>a</sup> ambiente), ya que ésta depende de la semejanza térmica. En nuestro caso, este proceso no es relevante dados los defectos encontrados. (Dipak Mazumdar, 2010)

La semejanza química se refiere a la similitud de los perfiles de concentración. Esto se logra cuando la tasa de transferencia de masa por difusión, convección y radiación tiene una relación fija con las tasas correspondientes. Esto ha de darse en cada reacción química en cada punto del modelo. Matemáticamente, esto es equivalente a:

$$\frac{N_{dif,modelo}}{N_{dif,prototipo}} = \frac{N_{conv,modelo}}{N_{conv,prototipo}} = \frac{N_{rkn,modelo}}{N_{rjn,prototipo}} = C_N$$
  
Ecuación 2

El perfil de concentración en un flujo con reacciones químicas es una función tanto de la transferencia de masa como de las velocidades de reacción química. Mientras que el transporte de masa depende del flujo, la tasa de reacción depende de la temperatura. La semejanza química es imposible de lograr en modelos fríos, debido a que la cinética de reacción química depende mucho la de la temperatura.

#### 3. Semejanza térmica

Es muy difícil de lograr entre los modelos de agua y de acero líquido, ya que los números de Prandtl de agua y de acero son muy diferentes, lo que afecta

significativamente a la transferencia de energía térmica. (Dipak Mazumdar, 2010) Para metales líquidos, el número de Prandtl es muy pequeño, generalmente en el rango de 0.01 a 0.001. Esto significa que la difusividad térmica , que está relacionada con la velocidad de transferencia de calor por conducción, es dominante. Esta muy alta difusividad térmica resulta de una conductividad térmica asimismo muy alta de los metales, que es aproximadamente 100 veces mayor que la del agua. (Connor, 2019)

Con todo ello, la semejanza térmica es muy difícil de lograr en la práctica, particularmente en modelos de agua, debido a:

- 1. La pérdida de calor a través de varias superficies de gran tamaño es difícil de replicar en modelos de agua
- 2. Las condiciones de flujo laminar prevalecen en la cercanía de la pared del molde. La diferencia sustancial entre el número de Prandtl de agua y acero (35 veces) hace que el transporte de energía térmica en las proximidades de las paredes sea diferente.

Como el fenómeno que estudiamos no está afectado por la solidificación, al darse ésta después del llenado, no compromete el experimento, aunque cuanto mayor sea la semejanza de escala, menos error se cometerá. (Stetsenko, 2012)

#### 4. Semejanza mecánica

La semejanza mecánica se ocupa de la similitud de fuerzas como el impulso y la velocidad. Está dividido en tres categorías:

#### Semejanza estática

No es muy importante en la fabricación de acero, excepto en el estudio de las fuerzas que actúan sobre las paredes de recipientes, fuerzas necesarias para mover / rotar hornos, licuefacción de la chatarra, etc. Durante la fabricación de acero, un reactor normalmente permanece estacionario mientras el líquido contenido en él se mueve debido a fuerzas aplicadas externamente (fuerza de flotabilidad durante la agitación del gas, fuerza gravitatoria en operaciones de llenado, etc.).

En nuestro caso, el estudio que buscamos reproducir está directamente relacionado con las operaciones de llenado, con lo que no nos afecta en nuestro experimento.

#### Semejanza dinámica

El flujo de metal fundido es el resultado de diversas fuerzas como la presión, la inercia, fuerzas viscosas, la tensión superficial y la fuerza gravitacional que actúan sobre el acero líquido. La semejanza dinámica se ocupa de la similitud de tales fuerzas que, aceleran o retardan el movimiento de fluidos en sistemas en movimiento. Estas han de corresponder en tiempo y posición en el modelo. El término "corresponder" implica que la relación de las fuerzas en consideración es una constante entre los dos sistemas, el modelo y el prototipo.

La pregunta que debemos abordar ahora es ¿cómo conocemos todas las fuerzas en un fluido en movimiento?

Consideremos el flujo de un líquido homogéneo a través de una tubería. La ecuación de conservación de la cantidad de movimiento aplicable a lo largo de la dirección axial, x, es

$$\frac{\partial}{\partial}(\rho U_x U_x) = -\frac{\partial p}{\partial x} + \frac{\partial}{\partial x} \left(\mu \frac{\partial U_x}{\partial x}\right) + \rho g_x$$
  
I II II IV  
*Ecuación 3*

donde las fuerzas inerciales son iguales a las viscosas, de presión y gravitacionales. Los números adimensionales encontrados en el modelado físico de la fabricación de acero son:

- Termino I = Fuerza inercial =  $\rho U^2 L^2$
- Termino II = Fuerza de presión =  $\rho L^2$
- Termino III = Fuerza viscosa =  $\mu UL$
- Termino IV = Fuerza gravitacional =  $\rho g L^3$

La simulación dinámica entre dos sistemas, el del modelo y el del prototipo, requiere que en un punto y tiempo concreto se mantengan las siguientes relaciones.

$$\frac{F_{I \ modelo}}{F_{I \ prototipo}} = \frac{F_{P \ modelo}}{F_{P \ prototipo}} = \frac{F_{U \ modelo}}{F_{U \ prototipo}} = \frac{F_{G \ modelo}}{F_{G \ prototipo}} = C_F$$
Ecuación 4

Alternativamente, se garantiza la semejanza dinámica entre los sistemas siempre que las siguientes igualdades se satisfagan en el tiempo y la posición

$$\begin{pmatrix} F_{I} \\ \overline{F}_{U} \end{pmatrix}_{modelo} = \begin{pmatrix} F_{I} \\ \overline{F}_{U} \end{pmatrix}_{prototipo}$$
 Ecuación 5
$$\begin{pmatrix} F_{I} \\ \overline{F}_{G} \end{pmatrix}_{modelo} = \begin{pmatrix} F_{I} \\ \overline{F}_{G} \end{pmatrix}_{prototipo}$$
 Ecuación 6

Ecuación 7

La *Ecuación 5*, *Ecuación 6* y *Ecuación 7* establecen que los criterios de semejanza dinámica son esencialmente debidos a varias fuerzas y representan diferentes grupos ó números adimensionales. Es a través de la igualdad de varios grupos adimensionales donde se establece la semejanza dinámica entre el modelo y prototipo. En el modelado de

 $\left(\frac{F_I}{F_P}\right)_{modelo} = \left(\frac{F_I}{F_P}\right)_{prototipo}$ 

flujo isotérmico, las siguientes igualdades son importantes:

$$(R_e)_{modelo} = (R_e)_{prototipo}$$

$$(F_r)_{modelo} = (F_r)_{prototipo}$$

$$(W_e)_{modelo} = (W_e)_{prototipo}$$

$$(E_u)_{modelo} = (E_u)_{prototipo}$$

$$Ecuación 10$$

$$(E_u)_{modelo} = (E_u)_{prototipo}$$

Los grupos adimensionales se expresan en términos de una velocidad característica y una escala de longitud y estos deben definirse adecuadamente. En muchos casos, esto no es sencillo ya que varias escalas de velocidad y longitud se encuentran en sistemas de flujo multidimensionales reales. Los grupos adimensionales son evaluados sobre la base del conocimiento a priori de la velocidad, escala de longitud, etc. de un determinado punto ubicado en el sistema. Por ejemplo, son conocidos la velocidad y diámetro en la boquilla de entrada de alimentación del molde por lo que es conveniente expresar correctamente los números adimensionales en esa zona.

Los criterios de semejanza derivados de las ecuaciones que definen el movimiento, por sí solos no son suficientes para resolver el problema. Las condiciones de contorno también deben ser consideradas. En sistemas geométricamente similares, esto no influye ya que las condiciones del límite de velocidad son similares tanto en el modelo, como en el prototipo.

En el modelado de flujos de acero fundido, puede que no sea siempre posible respetar todos los grupos adimensionales involucrados. Por ejemplo, en flujos homogéneos isotérmicos, las fuerzas inerciales, gravitacionales, viscosas y de presión son preponderantes. y por tanto, los números de Froude, Reynolds y Euler son importantes. Por lo que la equivalencia de los números de Froude y Reynolds asegura la semejanza dinámica entre dos sistemas geométricamente similares. La semejanza de Froude y Reynolds implica automáticamente la equivalencia del número de Euler.

Esto se obtiene de la Ecuación 1

$$\frac{1}{E_u} = f(R_e F_r)$$

Ecuación 12

Los criterios de semejanza dinámica para los dos casos límite se formulan a través de la igualdad de Reynolds, y la igualdad de Froude respectivamente Ecuación 8 y Ecuación 9.

La semejanza en base al número de Reynolds implica que la velocidad correspondiente en esa posición y tiempo varían en proporción a  $\lambda$ . Por el contrario, en

base a Froude implica dependencia de la velocidad en proporción a la raíz cuadrada de  $\lambda$ .

#### Semejanza cinemática.

En la fabricación de acero, el tamaño de los hornos, moldes y cubiletes suele ser grande y la intensidad del movimiento es apreciable. Dado que la viscosidad cinemática del acero  $\binom{\mu}{\rho}$  es extremadamente pequeña  $\approx 10^{-6} m^2/s$ , el número de Reynolds asociado con tales flujos es a menudo significativo (>  $10^4$ ). Por el contrario, el número de Froude es de dos a tres órdenes de magnitud más pequeña. Estos valores sugieren que, en la relación con las fuerzas de inercia, la contribución de las fuerzas viscosas al flujo es pequeña y, por lo tanto, puede ignorarse. En reducidos estudios de modelos acuosos a escala en la fabricación de acero, los flujos se toman para estar dominados por fuerzas inerciales y gravitacionales. Por tanto, la Ecuación 8 representa semejanza dinámica entre el modelo y los sistemas a gran escala si las fuerzas de tensión superficial no son importantes. Sin embargo, tal idealización no es necesaria en el estudio de modelos a gran escala (es decir,  $\lambda = 1$ ) o si se emplea un líquido diferente, que no sea agua, para representa acero fundido.

En los sistemas de partículas en movimiento, además de la similitud dinámica, también es importante la semejanza cinemática. Los sistemas móviles, que geométricamente son similares, también son cinemáticamente similares siempre que las partículas individuales tracen trayectorias de la misma forma en el modelo y en el prototipo. Eventos similares en el modelo y en el prototipo se corresponden en el tiempo siempre que los caminos sean geométricamente similares (es decir, están en proporción a  $\lambda$ ) y se mantiene la relación entre escalas de velocidad (es decir, dinámicamente similares).

Esto se ilustra en la Tabla 2.2 la cual indica que los sistemas geométrica y dinámicamente similares también son cinemáticamente similares. Un reflejo necesario de la semejanza cinemática entre los dos sistemas es la similitud de patrones de flujo o trayectoria de elementos fluidos individuales. (Esferas en nuestros experimentos, que representan las partículas del metal fundido)

Tipo de	Forma	Consecuencia	Implicaciones
Semejanza	matemática		
Cinemática	$\frac{\frac{L_{modelo}}{L_{prototipo}} = \lambda}{\frac{t_{modelo}}{t_{prototipo}} = C_t}$	$\frac{v_{modelo}}{v_{prototipo}} = \lambda C_t^{-1}$	-Dinámicamente semejantes -En flujos dominados por Froude $\lambda C_t^{-1} \rightarrow \lambda^{0.5}$
Dinámica	$\frac{\frac{L_{modelo}}{L_{prototipo}} = \lambda}{\frac{U_{modelo}}{U_{prototipo}} = \lambda^{0.5}}$	$\frac{t_{modelo}}{t_{prototipo}} = \lambda^{0.5}$	-Cinemáticamente semejantes

Tabla 2.2 Aspectos más relevantes entre la semejanza dinámica y cinemática



Figura 2.8 Trayectoria de una partícula esférica en sistemas geométrica y dinámicamente semejantes

Como los números adimensionales afectados, se expresan a través de una velocidad y longitud característica, se recomienda que estos sean los de las entradas de alimentación. (Dipak Mazumdar, 2010)

En esta semejanza se unen la estática, la dinámica y la cinemática representando las fuerzas que intervienen sobre las partículas.

La estática solo es significativa en los estudios cercanos a las paredes del refractario con lo que podemos despreciarla en nuestro estudio (Dipak Mazumdar, 2010). Las demás son influenciadas por la velocidad, viscosidad y la gravedad. En flujos isotérmicos con escala 1:1, la dinámica se puede considerar 1. (Julian Szekely, 1989). La viscosidad cinemática acero a tan altas temperaturas es casi igual a la del agua (Tabla 2.5) con lo que el flujo solo depende de los números adimensionales de Froude y Reynolds y por tanto, también iguala automáticamente el número de Euler (Dipak Mazumdar, 2010), los 3 números que son significativos en estos experimentos.

En la fundición de piezas grandes de acero, el flujo turbulento es muy intenso y el número de Reynolds asociado es significativamente alto, con lo que Reynolds cumple en ambos la equivalencia (Yue Qiang, 2009). El número de Fraude por el contrario es de un orden tres veces menor. En cualquier caso, la equivalencia del número de Reynolds implica que la velocidad en el punto correspondientes varía en proporción a  $\lambda$ . Por el contrario, la similitud de Froude implica una dependencia de la velocidad en proporción a raíz cuadrada de  $\lambda$ .

#### 2.5.3. SEMEJANZAS A UTILIZAR EN EL EXPERIMENTO

Si los dos sistemas (el prototipo y el modelo) son geométricamente similares, es decir, si tienen la misma forma, entonces se aplicarán las mismas ecuaciones y la única diferencia se introducirá a través de los factores de escala, es decir, se considerarán el

número de Reynolds y el número de Froude. En otras palabras, los dos sistemas son geométricamente similares, siempre que los números de Reynolds y Froude sean comparables.



Figura 2.9 Típico proceso de llenado

De ello se deduce que mediante la elección de la naturaleza del modelo de fluido y las dimensiones lineales para el equipo, se puede, en principio, lograr una fiel representación de la situación del flujo.

En realidad, estos sistemas pueden ser bastante más complejos. Como se muestra en la Figura 2.9 podemos ver que:

- 1) La corriente de metal que entra arrastrará gases, por lo que tenemos que tener en cuenta la evolución de burbujas de gas.
- El comportamiento de las partículas de inclusión, que en parte fluirán a la superficie, en parte se hundirán, y en otra parte serán arrastradas por la corriente de metal.
- 3) Tendremos en cuenta el movimiento de las olas en la superficie libre superior de la masa fundida.

Para representar estos fenómenos, será necesario invocar ecuaciones diferenciales y condiciones de contorno adicionales y más complejas, lo que a su vez dará lugar a algunos grupos adimensionales adicionales.

La importante consecuencia práctica de este gran número de grupos es que, mientras que las situaciones simples de una sola fase se modelan con bastante facilidad, la representación de los sistemas multifásicos más complejos en términos de modelado físico es bastante compleja. Este es el caso de los números adimensionales de Weber y Morton en fenómenos de superficie, ya que la tensión superficial de metales líquidos es muy diferente de la del agua.

La Tabla 2.3 muestra algunos de estos números adimensionales clave para el acero y el agua en moldes de tamaño idéntico.

Grupo	Definición	Aplicación
Reynolds	ρLU	Distinción del tipo de régimen (turbulento
	$\mu$	/ laminar) y Efectos viscosos
Froude	$U^2$	Olas en superficie
	$\overline{gL}$	
Froude	$\rho_g U^2$	Comportamiento de sistema gas liquido
modificado	$\frac{1}{(\rho_L - \rho_g)gL}$	
Peclet		Convección forzada y transferencia de
	α ΄ D	masa
Weber	$ ho L U^2$	Formación de burbujas
	$\overline{\sigma}$	
Morton	gμL <sup>4</sup>	Velocidad de burbujas en líquidos
	$\overline{\rho L \sigma^3}$	
Schmidt	$\mu$	Transferencia de masa
	ρD	
Prandtl	$\mu C_p$	Convección forzada y libre
	k	

Tabla 2.3 Algunos grupos adimensionales usados en el modelado de artesas

El aspecto importante que surge de esta tabla es que si el modelo de agua es del mismo tamaño (y por supuesto la misma forma) que el prototipo, situaciones simples de una fase pueden simularse con bastante facilidad (recordemos que los números de Froude y Reynolds son casi idénticos para el acero y el agua en modelo a escala 1:1)

Un modelo físico y un prototipo (el sistema real) son rigurosamente similares, si cumplimos los criterios de semejanza geométrica (el modelo y el prototipo son de forma idéntica, pero no necesariamente en la misma escala) y otra semejanza dinámica (las fuerzas que actúan sobre el sistema tienen la misma relación). En la práctica, esto se puede lograr si los números adimensionales clave son los mismos. En nuestro caso Reynolds y Froude. ¿Qué significa este concepto de semejanza en la práctica?

- Podemos modelar los efectos del flujo construyendo un modelo de plexiglás a gran escala y usando agua como fluido de trabajo. Esto satisfaría exactamente el requisito de igualdad de número de Froude y el número de Reynolds. Este modelo también debería darnos una buena idea de las olas (sin efectos de tensión superficial) y también de la formación de vórtices. Dentro de este contexto, también podemos modelar la dispersión de trazadores.
- El modelo del arrastre de aire, y en particular la evolución de las burbujas de gas arrastrado será cualitativo, pero debería dar una buena idea del comportamiento del sistema.
- 3) Por la misma razón, el modelado del comportamiento de inclusiones será

cualitativa, ya que el enfoque de modelado físico no será capaz de representar los diversos fenómenos que se ven afectados por la tensión superficial, tal como coalescencia o la escoria superior.

- 4) El modelado de los fenómenos de transferencia de calor, como las pérdidas de calor, será difícil debido a la gran disparidad en los valores de los números de Prandtl. Como solo nos estamos fijando en el movimiento de las partículas en el volumen fluido y la temperatura de vertido del acero es muy alta para que permanezca muy liquido hasta su llenado, no consideramos interesante este parámetro en nuestro experimento.
- 5) Finalmente, el modelado de configuraciones que involucran amortiguación magnética y calentamiento por inducción sería imposible usando agua debido a las diferencias en las conductividades eléctricas. (no es interesante en nuestro experimento)
- 6) Con estas advertencias, el modelado físico ha demostrado ser una herramienta muy eficaz para optimizar el diseño.

Numero adimensional	Acero	Agua	Mercurio
Reynolds	1	1.1	1
Froude	1	1	1

Tabla 2.4 Valores adimensionales normalizados con el acero (Mclean, 1987)

Estos números son fácilmente calculables partiendo de las propiedades del acero y del agua a las condiciones del experimento y de un proceso de fundición normal. Ejemplos de datos tenemos de varios artículos de investigación:



Figura 2.10 Densidad del acero en función de la temperatura (Rywotycki, 2014)



Figura 2.11 Viscosidad dinámica en función de la temperatura (Rywotycki, 2014)

Physical properties	Liquid steel at 1600°C	Water at 20 <sup>0</sup> C
$ ho$ , kgm $^3$	7000	1000
μ, kgm <sup>-1</sup> s <sup>-1</sup>	6.7x10 <sup>-3</sup>	1.1x10 <sup>-3</sup>
V, m <sup>2</sup> s <sup>-1</sup>	0.913x10 <sup>-6</sup>	1x10 <sup>-6</sup>
$\sigma$ , Nm <sup>-1</sup>	1.6	0.073

 $\rho$  density;  $\mu$  viscosity;  $\nu$  kinematic viscosity;  $\sigma$  surface tension

Tabla 2.5 Características del agua y el acero para los cálculos de los números adimensionales (Kumar, 2008)



Figura 2.12 Viscosidad dinámica del mercurio a diferente temperatura (The engineering toolbox, 2021)

Fluid	Dynamic Viscosity (Ns/m <sup>2)</sup>	Kinematic Viscosity (m <sup>2</sup> /s)
Water	1.00 x 10 <sup>-3</sup>	1.00 x 10 <sup>-6</sup>
Sea Water	1.07 x 10 <sup>-3</sup>	1.04 x 10 <sup>-6</sup>
Mercury	1.56 x 10 <sup>-3</sup>	1.15 x 10 <sup>-7</sup>

Figura 2.13 Viscosidades para el mercurio (Engieneers Edge, 2021)

T (K)	$T(^{\circ}C)$	$\rho(g \ cm^{-3})$
77	-196.15	14.70
78.15	-195	14.49
82.15	-191	14,469
194.15	-79	14.29
234.321	-38.829	14,182
234.321	-38,829	13,690
293.15	20	13.5460
293.15	20	13.545892
293.15	20	13.545884
298.15	25	13.5338
303.15	30	13.5213
313.15	40	13,4969
323.15	50	13.4725
333.15	60	13.4482
343.15	70	13.4239
353.15	80	13.3997
363.15	90	13.3755
373.15	100	13.3514
383.15	110	13.3273
393.15	120	13.3033
403.15	130	13.2792
413.15	140	13.2553
423.15	150	13.2314
425	151.85	13.23
471	197.85	13.12
519	245.85	13.00
571	297.85	12.88
633	359.85	12.73
681	407.85	12.61
691	417.85	12.60
693	419.85	12.60
715	441.85	12.59
758	484.85	12.45
787	513.85	12.35
838	564.85	12.25
900	626.85	12.11
930	656.85	12.02
979	705.85	11.86

Figura 2.14 Densidad del mercurio a diferentes temperaturas (Leonid F Kozin, 2013)

$$R_{e \ agua} = \frac{1000 * L * 1 * 10^{-6}}{1.1 * 10^{-3}} = (L \ podemos \ considerar = 1 \ por \ ser \ \lambda = 1)$$
$$= 1$$

$$R_{e\ acero} = \frac{7000 * L * 0.913 * 10^{-6}}{\frac{6.7 * 10^{-3}}{= 0.9538}} = (L\ podemos\ considerar = 1\ por\ ser\ \lambda = 1)$$

$$R_{e\,mercurio} = \frac{13545 * L * 1.15 * 10^{-7}}{1.56 * 10^{-3}}$$
  
= (L podemos considerar = 1 por ser  $\lambda$  = 1) = 0.9985

$$F_{r agua} = \frac{1 \ (velocidad \ de \ estudio)}{9.8 * L} = (L \ podemos \ considerar = 1 \ por \ ser \ \lambda = 1)$$
$$= 0.102$$

$$F_{r \ acero} = \frac{1 \ (velocidad \ de \ estudio)}{9.8 * L} \\ = (L \ podemos \ considerar = 1 \ por \ ser \ \lambda = 1) = 0.102$$

$$F_{r \ mercurio} = \frac{1 \ (velocidad \ de \ estudio)}{9.8 * L} = (L \ podemos \ considerar = 1 \ por \ ser \ \lambda = 1) = 0.102$$

Que si las normalizamos respecto al agua obtenemos los valores de la Tabla 2.4

Como podemos observar de la definición y cálculo de los números adimensionales que son significativos en el proceso físico de estudio, todos ellos dependen del factor de escala.

Por eso, en este tipo de estudios se escoge, si el laboratorio tiene la capacidad, las escalas 1:1 con agua, ya que respeta todo el proceso físico de los procesos de fundición muy turbulentos. Ejemplos de ellos tenemos en estudios de colada continua por artesa (Jing Jiang, 2010), (Yue Qiang, 2009), (Eudoxio Ramos Gomez, 2013), (R. Sanchez, 2003), (Hua Bai, 2001), y otros muchos.

En nuestro caso, dispones de las instalaciones para construir la pieza a escala 1.1, lo que nos permite trasladar todos los valores del cálculo directamente del modelo a la pieza real y viceversa.

#### 2.5.4. COMPARACIÓN CON CASO REAL Y LIMITACIONES DEL MODELO

La combinación de modelo a escala 1:1 con llenado de agua, simulación de trayectoria de partículas con esferas de diferentes densidades y diámetros, y con la simulación CFD con trayectoria de partículas, nos permite el seguimiento y verificación de los procesos físicos acaecidos durante el llenado hasta la solidificación en esas fases intermedias

En el trabajo que estamos desarrollando para la determinación de defectología que se produce en determinadas condiciones y geometría de pieza, existe el problema de

visualizar el comportamiento del acero líquido en las fases intermedias para poder entender la aparición de determinados defectos muy significativos y especiales en la pieza de estudio.

Estas condiciones en los resultados de simulación están fuertemente influenciadas por la manera de llenado de la pieza. Pudiendo obtener un acierto del 95%, si el sistema de llenado es de una manera, y del 0% si es de otra, sin cambiar ninguna de las demás variables.

Esto es lo que nos ha obligado a buscar otras alternativas a la simulación de CFD como herramienta para entender el fenómeno físico.

Las temperaturas de llenado han de ser >1200 C para que la viscosidad del acero sea comparable a la del agua. Por debajo de estas temperaturas estaríamos en otros fenómenos físicos.

Durante el proceso de fundición por gravedad de arena en verde de la pieza se decidió, por temas de costes de producción, reducir el número de canales de alimentación. Esta decisión aumentó la velocidad de llenado en el canal de manera significativa para mantener el tiempo total de llenado de la pieza, por el condicionante del tiempo de solidificación. Esto permitía reducir tiempos y costes de construcción de canales y molde, y reducir tiempos y costes de corte y rebaba.

Se pasó de un proceso de alimentación de colada por la parte inferior y de velocidades bajas, en nuestro caso de 0,5 m/s (Figura 2.3 Esquema de fabricación por 4 canales inferiores y 3 mazarotas en la parte 3), a alimentación lateral por canales más estrechos que aumenta la velocidad de alimentación, que puede llegar hasta 4 m/s (Figura 2.4 Esquema de fabricación por 2 canales directos y 3 mazarotas en la parte superior)

Las piezas obtenidas a través del sistema que muestra la Figura 2.3 pasaron los controles de calidad establecidos en las especificaciones del cliente, pero en las fundidas, según la Figura 2.4, aparecieron unos defectos importantes y muy significativos por el tipo de defecto.



Figura 2.15 Líneas que marcan la frontera del defecto (de 1 a 3 m y de hasta 300 mm de ancho)



Figura 2.16 Los defectos que aparecen son importantes en tamaño

Estos y otros defectos aparecidos en los muñones de la pieza están formados por óxidos de acero, algunas escorias y segregaciones (Figura 2.5, Figura 2.6 y Figura 2.15). Por el tipo de defecto que son, son buenos trazadores para investigar los procesos fisicoquímicos que ocurren dentro del molde, que es de imposible acceso durante el llenado y solidificación para su estudio.

Esta defectología invita a estudiar y caracterizar qué ocurre en los metales líquidos y sus procesos fluidodinámicos en detalle y que han sido poco estudiados por la dificultad de medición.

Los softwares de CFD dan buenos resultados teóricamente con velocidades mayores, pero los diseñadores conocen esta regla empírica y procuran que estén siempre por debajo de 1m/s. Los softwares actuales tienen la posibilidad de ver los vectores de velocidad en diferentes colores en tiempo real de llenado

De aquí la importancia de correlacionar los resultados reales con los de CFD a velocidades mayores de 1 m/s en el llenado.

## 2.5.5. **DEFINICIÓN DEL PROBLEMA**

Necesitamos poder visualizar qué le ocurre a la partícula de metal líquido en su recorrido por el interior del molde, durante el llenado y antes de la solidificación.

Debemos definir varios tipos de partículas acordes con los defectos aparecidos en la pieza y que nos servirá como trazadores comparadores

- Partículas de densidad igual al metal líquido que representan la pieza sin defectos
- Partículas de densidad menor que el metal líquido que representan los óxidos y escorias aparecidos en los defectos
- Partículas de densidad mayor que el metal líquido que representan las arenas sueltas o arrancadas del molde durante el proceso de llenado.

Daremos diferentes diámetros a estas partículas para que se pueda estudiar sus agrupaciones durante el llenado y la influencia del diámetro en su posición final. De estas simulaciones podremos sacar las correlaciones con los resultados experimentales de laboratorio y pieza fundida.



Figura 2.17 Defectos de arena. Su geometría se puede asimilar a una esfera irregular



Figura 2.18 Defectos de gas. Se puede observar cómo una esfera con algo de cola

#### 2.5.6. VIABILIDAD PRÁCTICA Y ECONÓMICA

El acero líquido se sitúa en la industria entre 1450°C y 1650°, dependiendo de la pieza. A estas temperaturas de trabajo solo son resistentes las arenas de sílice que son opacas a la luz visible. Además, los metales líquidos son opacos en estado líquido, con lo que se suma al problema de la visualización del flujo. En el mejor de los casos sólo se puede ver el comportamiento de su superficie de llenado.

Las técnicas de radiografiado en tiempo real son viables en espesores pequeños de acero menores de 10 mm. La técnica de radiografiado industrial consiste en generar rayos X a través del choque de electrones contra una placa de wolframio mediante diferentes métodos. La energía emitida depende del método utilizado (Figura 2.19)

Esta energía emitida puede atravesar cuerpos. La capacidad depende de la energía de estos RX, del espesor del cuerpo a atravesar, de su densidad y de la sensibilidad del receptor. El tiempo de exposición depende de todos estos factores. Este tiempo puede oscilar entre décimas de segundo para materiales delgados (<5 mm) y poco densos, y horas para grandes espesores (> 50 mm) y densidades altas como el acero.



Figura 2.19 RX de llenado de aluminio en proceso Disamatik (cortesía fabricante)

El problema es que implica horas de exposición con los equipos de RX industrial como la Figura 2.20. En nuestro caso, el llenado es una situación dinámica que no puede ser radiografiada por ocurrir en segundos.



Figura 2.20 Tubo de RX conectado a un sensor CMOS para visualización digital

Este tiempo se reduce aumentando considerablemente la energía emitida y aumentando la sensibilidad del receptor. Se han realizado pruebas con aceleradores de partículas de 8 Mev y sensores CMOS de calidad astrofísica, donde se puede bajar el tiempo de radiografiado a décimas de segundo. El proceso de llenado es de 65 segundos y se ha de conseguir 16 fotogramas / segundo (Figura 2.22)



Figura 2.21 Pruebas con tubos de RX de micrófono



Figura 2.22 Pruebas de radiografiado de acero con aceleradores médicos y sensores Cmos

Estas pruebas hechas en condiciones ideales de laboratorio, dentro de un bunker (Figura 2.22) para protección radiológica de 1.5 metros de espesor, son imposibles de llevar dentro de un proceso productivo de fundición por los altísimos costes que implican y las dificultades de seguridad que conllevan para el personal. A estos espesores de pieza habría que sumarles los espesores del molde de arena, de caja de moldeo, de utillaje, ... podríamos hablar de más de 1 metro de pared de estudio. Lo cual complica más el proceso. Esto eleva los costes del estudio a un nivel que son inviables en la industria y en el presupuesto disponible.

Para poder visualizar físicamente el movimiento de la partícula de metal líquido y poder compararla con el recorrido que hace en el modelo computacional de CFD, necesitamos un paso intermedio no destructivo. Esto es, construyendo un modelo a escala 1:1 para evitar en lo máximo posibles problemas de simulación en diferentes escalas y con un líquido que sea transparente al ojo humano y manejable sin peligro, así como de bajo coste.

Para ello partimos de los trabajos experiméntales realizados por el Dr Atsumi Ohmo y publicados en 1987 sobre el movimiento y cristalización del acero simulado con sales disueltas en agua (Ohno, Solidification. The Separation Theory and its Practical Applications, 1987), como punto de partida para luego continuar con los estudios sobre números adimensionales tratados anteriormente.

Estos resultados los compararemos con las simulaciones de CFD y con los defectos encontrados en las piezas, buscando las correlaciones Figura 2.7 y el camino en la Figura 2.23



Figura 2.23 Tipos de modelos en siderurgia (Dipak Mazumdar, 2010)

# CONSTRUCCION DEL MODELO NUMERICO Y VALIDACION MEDIANTE ENSAYOS EXPERIMENTALES

## 3. CONSTRUCCION DEL MODELO NUMERICO Y VALIDACION MEDIANTE ENSAYOS EXPERIMENTALES

En esta sección se presenta el diseño de la parte experimental, así como la construcción del modelo numérico que será validado a partir de los resultados experimentales.

Como ya hemos comentado en el capítulo 1, los más avanzados fabricantes de software se están concentrando en la industria, dando así paso a unas pocas soluciones de software que puedan abordar en estos momentos los complejos procesos de fundición.

La diferencia entre ellos es muy sutil y está encerrada en la forma en como abordan la simplificación de cálculos para conseguir resultados aproximados en la menor cantidad de tiempo, acumulando el menor error posible. Esto depende de la industria y sector en el que se utilice.

Después de muchas pruebas y contrastar resultados con piezas reales, podemos decir que todos ellos son muy buenos y las aproximaciones que dan son semejantes a la realidad a velocidades menores de 1 m/s. Esta afirmación está basada en las múltiples pruebas que se hicieron en la empresa para comprar software de simulación matemática.

Sin embargo, hemos podido observar que las simplificaciones e hipótesis que se toman en Flow-3D para fundición, dan resultados más precisos que con otros fabricantes. Es en este nivel de detalle, que puede no tener importancia en el proceso productivo general, pero que en nuestro estudio es de suma importancia, es por el cual, hemos realizado toda la experimentación y simulaciones apoyándonos en este software.

Ahora entraremos a estudiar en detalle que ecuaciones utiliza y que suposiciones asume en el cálculo del llenado de piezas de fundición.

## 3.1. MODELO NUMÉRICO

#### 3.1.1. ECUACIONES DE MOVIMIENTO DEL FLUIDO

El flujo del metal fundido durante el proceso de fundición es un problema no lineal de un fluido de superficie libre e incompresible. Existen dos fenómenos físicos principales que gobiernan el proceso, el flujo y la solidificación del acero. La aleación fundida se considera un fluido newtoniano incompresible. Para el flujo newtoniano global, la ecuación de continuidad de masa y las ecuaciones de momento se resuelven, como se indica en la Ecuación 13 y Ecuación 14 respectivamente.

$$\nabla u = 0$$

Ecuación 13
$$\rho\left(\frac{\partial u}{\partial t} + u\nabla u = -\nabla p + \mu\nabla^2 u\right)$$

Ecuación 14

Donde

- *u* es la velocidad del líquido fundido,
- $\rho$  es la densidad,
- t es el tiempo
- p es la presión.

El paquete comercial FLOW-3D se utiliza para calcular el flujo newtoniano incompresible. Es un software capaz de analizar varios procesos físicos de flujo que resuelven las ecuaciones mediante el uso del Método de Volumen Finito (FVM), junto con la técnica de Volumen de Fluido (VOF) (Hirt C. N., 1981) para rastrear la ubicación de superficies y aplicar las condiciones de contorno dinámicas adecuadas en esas superficies. Además, el solucionador residual ó Generalized Minimal Residual Algorithm (GMRES) se utiliza para resolver la presión y las velocidades. El modelo FLOW-3D, junto con un algoritmo de dinámica de partículas, capturó con éxito las velocidades de propagación decrecientes de las corrientes de gravedad impulsadas por partículas ó particle-driven gravity currents (PDGC). (Flow 3D Science, 2017)

En el modelo de turbulencia RNG  $k - \mathcal{E}$  la energía cinética turbulenta k y su tasa de disipación  $\varepsilon$  se obtienen de las siguientes ecuaciones de transporte Ecuación 15 y Ecuación 16 respectivamente:

$$\frac{\partial k}{\partial t} + u_j \frac{\partial k}{\partial x_j} = \frac{\partial}{\partial x_j} \left[ \frac{v_t}{\sigma_k} \frac{\partial k}{\partial x_j} \right] + P + G - \varepsilon$$

Ecuación 15

$$\frac{\partial \varepsilon}{\partial t} + u_j \frac{\partial}{\partial x_i} = \frac{\partial}{\partial x_j} \left[ \frac{v_t}{\sigma_{\varepsilon}} \frac{\partial \varepsilon}{\partial x_j} \right] + C_{l\varepsilon} \frac{\varepsilon}{k} (P + c_{3\varepsilon}G) - c_{2\varepsilon}\rho \frac{\varepsilon^2}{k} - R_{\varepsilon}$$
  
Ecuación 16

donde P, G, and R son definidas en las Ecuación 17 a Ecuación 19

$$P = v_t \left[ \frac{\partial u_i}{\partial x_j} + \frac{\partial u_j}{\partial x_i} \right] \frac{\partial u_i}{\partial x_j}$$
  

$$G = \frac{g_i}{\rho_r} \frac{v_t}{S} \frac{\partial \rho}{\partial x_i}$$
  
Ecuación 18

$$R = \frac{c_{\mu} \eta^3 \left(1 - \frac{\eta}{\eta_0}\right)}{1 + \beta \eta^3} \frac{\varepsilon^2}{k}$$

Ecuación 19

Siendo (Necker, 2002)

- $c_{\mu} = 0.085$
- $c_{1\varepsilon} = 1.42$
- $c_{2\varepsilon} = 1.83$
- $c_{3\varepsilon} = 0.2$
- $\sigma_k = 1.39$
- $\sigma_{\varepsilon} = 1.39$
- $\beta_0 = 0.015$
- $\eta_0 = 4.38$

El parámetro  $\eta$  es la relación de la escala de tiempo turbulento, definida por la Ecuación 20 como

$$\eta = S \frac{k}{\varepsilon}$$

Ecuación 20

Supusimos que las fuerzas inducidas por el asentamiento de partículas tienen una influencia insignificante en el movimiento de la fase fluida. Así, el movimiento de la fase fluida se resuelve mediante la ecuación de Navier-Stokes con acoplamiento bidireccional entre las partículas y el fluido (Ungarish, 2009). Sin embargo, para describir el movimiento inducido por fuerzas de flotación impulsadas por partículas, la ecuación de advección-difusión turbulenta se acopla con la ecuación de Navier-Stokes mediante el término de flotabilidad (Sutherland, 2004)

#### 3.1.2. ECUACIONES DE MOVIMIENTO DE LAS PARTÍCULAS

Se pueden incluir múltiples especies de partículas de masa en la simulación de fluidos en FLOW-3D. La dinámica de las partículas de masa se rige por la ecuación: (Flow 3D Science, 2017)

$$\frac{du_p}{dt} = -\frac{1}{\rho_p} \nabla P + g + \beta (u - u') |u - u'| \frac{\rho}{\rho_\rho}$$

Ecuación 21

Donde

$$u^1 = u_p + u_{diff}$$

• *u*<sub>p</sub>Velocidad media de las partículas

- $\rho_p$  densidades medias de las partículas
- g incluye la gravedad y otras fuerzas corporales,
- *u* velocidad del fluido
- *P* presión del fluido
- $\beta$  coeficiente de arrastre.

La velocidad de difusión de las partículas  $u_{diff}$  se evalúa de acuerdo con la técnica de Monte Carlo y se suma a la velocidad media Hay que tener en cuenta que las partículas no interactúan entre sí.

El coeficiente de arrastre  $\beta$  es una función del número de Reynolds del flujo de fluido alrededor de las partículas

$$R_e = \frac{d\rho \ U}{\mu}$$

Ecuación 22

Donde

- *d* es el diámetro de la partícula
- U = |u u'|
- $\mu$  es la viscosidad del fluido.

Para partículas esféricas, este coeficiente de arrastre viene dado por la relación empírica

$$C_D = \frac{4d}{3}\beta = \left(\frac{24}{R_e} + \frac{6}{1 + \sqrt{R_e}} + 0.4\right)$$

Ecuación 23

Para números de Reynolds pequeños, la fuerza de arrastre dada por la Ecuación 23 se aproxima a la solución analítica de Stokes para un flujo laminar viscoso alrededor de una esfera. La variable de entrada PDRG3 (FLOW 3D, 2021) se utiliza como multiplicador del coeficiente de arrastre dependiente del número de Reynolds.

Se puede aplicar un modelo de partículas de múltiples especies para simular partículas de tamaños variables o de densidad variable. Por ejemplo, este modelo podría usarse para modelar inclusiones extrañas en metales líquidos o partículas de polvo en el aire. (FLOW 3D, 2021)

#### 3.1.3. MÉTODO DEL AIR-GAB-BRIEF USADO POR EL SOFTWARE CFD FLOW 3D

FLOW-3D es un software de simulación dinámica de fluidos computacional (CFD) de uso general (FLOW 3D, 2021). Emplea estrategias de simulación numéricas creadas para resolver las ecuaciones de movimiento de fluidos y obtener soluciones transitorias y tridimensionales a problemas de flujo complejas. El gran abanico de opciones físicas y matemáticas nos permite aplicarlo a una amplia variedad de fenómenos de flujo y transferencia de calor.

El movimiento del fluido se define con ecuaciones diferenciales de segundo orden no lineales y transitorias. Las ecuaciones de movimiento de fluidos deben emplearse para resolver estas ecuaciones.

El modelo numérico empieza en una malla o cuadrícula. Esta compuesta de una serie de elementos interconectados, o celdas. Estas celdas dividen el espacio físico en pequeños volúmenes con varios nodos asociados con cada volumen. Los nodos se utilizan para almacenar valores de variables, como velocidad, temperatura y presión. La malla es el espacio matemático que reemplaza al espacio físico real y proporciona los medios para definir las variables de flujo en ubicaciones discretas, establecer condiciones de contorno y desarrollar aproximaciones numéricas de las ecuaciones de movimiento del fluido. La estrategia FLOW-3D se basa en dividir el dominio de flujo en una cuadrícula de celdas rectangulares, a veces llamadas elementos de ladrillo.

Una malla matemática discretiza el espacio físico. Cada parámetro de fluido está definido en una malla por una matriz de valores en puntos. Debido a que los parámetros físicos reales varían continuamente en el espacio y el tiempo, una malla con un espaciado fino entre nodos proporciona una mejor resolución de la que pasa en el fluido real. Esta es una propiedad fundamental de una aproximación numérica, la cual nos dice que cualquier iteración numérica válida se acerca a las ecuaciones originales a medida que se reduce el tamaño de la cuadrícula. Si una aproximación no cumple esta condición, debe considerarse errónea.

Las rejillas rectangulares son matemáticamente fáciles de crear y guardar debido a su naturaleza regular y estructurada. Un espacio de cuadrícula no uniforme agrega versatilidad cuando se combinan dominios de flujo complejos. Las celdas matemáticas se numeran de manera consecutiva utilizando tres índices, i en la dirección x, j en la dirección y y k en la dirección z. Con esto conseguimos que cada celda en una malla puede ser identificada por su dirección (i, j, k), similar a las coordenadas de un punto en el espacio.

Las rejillas rectangulares conllevan beneficios adicionales a la facilidad del desarrollo de métodos numéricos como la precisión y estabilidad de las soluciones matemáticas. En esas mallas se han construido los algoritmos numéricos más antiguos basados en la diferencia finita y los métodos de volumen finito. Esto es la base de la estrategia del enfoque matemático del FLOW-3D.

La primera aplicación de métodos para obtener soluciones numéricas a ecuaciones diferenciales fue desarrollada por Euler en 1768 El método de diferencias finitas se basa en las propiedades de la expansión de Taylor y en la aplicación directa de la definición de derivadas. El método de volumen finito se deriva directamente de las leyes de conservación para el movimiento de fluidos y por lo tanto posee las propiedades de conservación.

FLOW-3D puede operarse en varios modos correspondientes a diferentes casos limitantes de las ecuaciones generales de fluidos. Por ejemplo, un modo es para flujos compresibles, mientras que otro es para situaciones de flujo puramente incompresibles. En este último caso, la densidad y la energía del fluido pueden suponerse constantes y no es necesario calcularlas. Además, si hay un fluido y dos modos de fluido, la superficie libre se puede incluir en el modo incompresible de un fluido.

Es difícil construir superficies libres en cualquier entorno matemático porque las variables de flujo y las propiedades de los materiales tales como la densidad, la velocidad y la presión pueden experimentar de una discontinuidad. En FLOW-3D se hace una simplificación, la inercia del gas adyacente al líquido se desprecia, y el volumen adyacente ocupado por el gas, se sustituye por un espacio teórico vacío de masa, definido por una presión y temperatura uniformes.

Esta estrategia tiene como virtud la de reducir el esfuerzo computacional, ya que en la mayoría de las situaciones que se presentan en la vida real, los detalles del movimiento del gas no son importantes para el movimiento de un líquido mucho más denso. La superficie libre se convierte en uno de los límites externos del líquido. Una exacta definición de las condiciones de contorno en la superficie libre del liquido es fundamental para una definición precisa de la dinámica de la superficie libre.

En FLOW-3D se usa el método de Volumen de Fluido (Volume of Fluid = VOF), que consta de tres componentes principales:

- Definición del volumen de la función del fluido,
- Método para resolver la ecuación de transporte VOF
- Establecimiento de las condiciones de contorno en la superficie libre. (Hirt T., s.f.)

### 3.2. PARÁMETROS DE SIMULACIÓN FLOW-3D

#### **3.2.1. ESTUDIO DE SENSIBILIDAD DE LA MALLA**

Para determinar la sensibilidad del mallado se realizaron una serie de pruebas con diferentes tamaños de celda, tal y como se muestra en la siguiente tabla:

numero de celdas	mejora (%)	tiempo de cálculo (horas)
3000000	1,00	12
4000000	1,40	40
5000000	1,47	75
6000000	1,50	123
7000000	1,51	197

Tabla 3.1 Resultados de sensibilidad de malla



Figura 3.1 Análisis de sensibilidad CFD

El factor de mejora de 4.000.000 es el que escogemos como el más eficiente en términos de recursos.

Para el mallado se utilizó un modelo Cartesiano con puntos fijos en las superficies planas y paralelas a los planos cartesianos:

Tamaño de celda de  $0.0075 \text{ m} \ge 0.0075 \text{ m} \ge 0.0075 \text{ m}$ . Número total de celdas 3,857,572.



Figura 3.2 Datos de la geometría de pieza



Figura 3.3 Celdas de control



Figura 3.4 Detalles del tamaño de las celdas en las diferentes partes del modelo

# 3.2.2. CONDICIONES DE CONTORNO

Las corrientes impulsadas por la flotabilidad generalmente surgen debido a variaciones de temperatura, material disuelto o sólidos en suspensión, por lo que su formación y evolución están influenciadas por diversas condiciones. La densidad del acero al 0,2% C se considera variable en función de la temperatura (Furumoto, 2012). Las condiciones de contorno para el modelo CFD acero líquido se muestran en la siguiente tabla:

Feeding Pressure (Pa)	33,844.5
Feeding temperature (°C)	1,590
Viscosity (Pa·s)	0.0059
C <sub>p</sub> (J/kg K)	732
Thermal conductivity (W/m K)	26.9
Fusion latent heat (J/kg)	2.77 10 <sup>5</sup>
Turbulent length average (m)	0.0028

Tabla 3.2 Datos de características físicas en el software

# 3.2.3. SIMULACIÓN DE LLENADO

Opciones generales	Flujo incompressible		
	Un Fluido en superficie libre (truVOF) (Hirt & Nichols, 1981)		
Modelos Físicos	Defect tracking. Defect generation	1	
	rate		
	Density evaluation.	Función de la	
	,	temperatura	
	Gravity	9.81 m/s2	
	Heat transfer	Completa	
	Particles	Partículas sin masa	
		Diámetro: 0.01m	
		Coeficiente de drag:	
		2.375	
	Solidification	Sin contracción	
	Viscosity and turbulence	Regimen turbulento	
		RANS k-e RNG	
		TLEN 0.0028m	
Fluidos	Steel	0.2% Carbon AISI	
		1026	
	Density	Figura 3.5	
	Viscosity	0.0059 Pa·s	
	Specific Heat	726 J/kg·K	
	Thermal conductivity	32.3 W/K∙m	
	Liquidus temperature	1524.85°C	
	Solidus temperature	1494.851°C	
	Latent Heat of fusion	2.77e5 J/Kg	
	Critical solid fraction	0.9	
	Critical coherent fraction	0.15	
Meshing and Geometry	Initial temperature	30°C	
	Thermal Conductivity	Figura 3.6	
Material y propiedades	Arena Verde		
	Coeficiente de transferencia de calor		
	estimado por el programa		
Tamaño de celda	0.0075m		
Resto de Condiciones de	de Zmax		
contorno	Presión	33844.5Pa = 0.5m de	
		columna de fluido	

	Temperatura	1590°C (únicamente
		en los casos con
		acero)
	Xmin	Simetría
Condiciones iniciales	Temperatura ambiente	30°C
	Temperatura molde	30°C
	Presión ambiente	0 Pa
Opciones Numéricas	Tipo de solver	presión-velocidad
1	Implicito, GMRES (Generalized	
	minimal residual method)	
	Resto de solvers	Explicitos
	Tensión viscosa	
	Presión superficie libre	
	Transporte	
Transferencia de calor	Algoritmo	Volume-of-Fluid
		(VOF)
	TruVOF Automático	
Transporte de la cantidad	1er orden	
de movimiento		

Tabla 3.3 Variables del software



Figura 3.5 Densidad del acero en función de la temperatura (datos del software)



Figura 3.6 Conductividad térmica en función de la temperatura

Opciones generales	Flujo incompressible	
	Un Fluido en superficie libre	
	(truVOF) (Hirt & Nichols,	
	1981)	
Modelos Físicos	Defect tracking. Defect	1
	generation rate	
	Density evaluation.	Función de la temperatura
	gravity	9.81m/s2
	Heat transfer	Completa
	Particles	Desactivado
	Solidification	Con contracción y flujo
	Viscosity and turbulence	
		RANS k-e RNG
		TLEN 0.0028m
Fluidos	Steel	0.2% Carbon AISI 1026
	Density	Figura 3.5
	Viscosity	0.0059 Pa·s
	Specific Heat	726 J/kg⋅K
	Thermal conductivity	32.3 W/K∙m
	Liquidus temperature	1524.85°C
Solidus temperature		1494.851°C
	Latent Heat of fusion	2.77e5 J/Kg
	Critical solid fraction	0.9
	Critical coherent fraction	0.15
	Initial temperature	30°C

# 3.2.4. SIMULACIÓN DE SOLIDIFICACIÓN

Meshing and Geometry	Thermal Conductivity	Figura 3.6
Tamaño de celda	0.015m	
ZmaxPresión	0	
Temperatura	25°C	

Tabla 3.4 Variables de simulación en software

La Renderización de la geometría se realizó tras aplicar el algoritmo FAVOR. El tratamiento de la capa limite es de ley logarítmica. El criterio de convergencia es dinámico y esta automáticamente calculado por FLOW-3D. El multiplicador aplicado ha sido 1. El ordenador donde se realizaron los cálculos es una Workstation con dos procesadores XEON5620 con 8 Gb de RAM cada uno sobre Windows 7 64 bits.

#### **3.3. RESULTADOS**

### 3.3.1. RESULTADOS SIMULACIÓN DE LLENADO

El tiempo de llenado es de 82,97 s. coincidente con los datos de producción en fábrica. En la simulación CFD de la Figura 3.3.1.1 se observa que la superficie de llenado tiene pocas probabilidades de tener defectos debido al llenado. Además, estas zonas no coinciden con las zonas de los defectos que observamos en las piezas reales Figura 2.5 y Figura 2.6. pero intuyen los arrastres de arena



Figura 3.7 Resultados de la simulación en probabilidad de defectos en superficie por llenado

Todas las fases del llenado se pueden observar a lo largo del tiempo, para poder entender mejor donde se forman problemas específicos como el golpe del salto hidráulico u olas superficiales. Estos fenómenos fluidodinámicos suelen ser generadores de defectos metalúrgicos en determinadas condiciones.



Figura 3.8 Simulación fluidodinámica del acero liquido

Los datos de simulación fluidodinámicos nos dicen que no se producen ningún problema debido a este proceso, tal y como nos dan los resultados en fábrica.

# 3.3.2. RESULTADOS SOLIDIFICACIÓN

Tiempo de solidificación 5895 segundos (1h 38min). Como se observa este tiempo es mucho mayor que el de llenado. Las empresas de fundición usan tiempos de llenado lo más rápido posibles para evitar los problemas de solidificación de partículas sueltas en el flujo.

En la Figura 3.9 vemos las zonas de posible acumulación de defectos con mazarotas. Como se observa en la figura las mazarotas cumplen su función de recoger la mayor parte de los efectos debidos a la contracción por enfriamiento del fluido.



Figura 3.9 Resultado de simulación en probabilidad de defectos debido a la solidificación

En la Figura 3.10 vemos la zona de posibles defectos retiradas las mazarotas. Las zonas rojas indican la mayor probabilidad de encontrar defectos por contracción (rechupes). En las piezas de nuestro estudio no se daban estos defectos.



Figura 3.10 Resultado de la simulación en probabilidad de defectos debido a la solidificación (sin mazarotas)

Una sección más en detalle de las mazarotas Figura 3.11 nos permite ver que, en la pieza, en esas zonas no ha de presentar defectos y la probabilidad de encontrarlas es extremadamente baja.

temperature			
1564.712			
1308.927			
1053.141			
797.356			
541.571			
285.785			
30.000			
7			
	E.	9	

Figura 3.11 Zonas de contracción dirigida en mazarotas

La simulación termodinámica de la pieza nos da como resultado que no aparece ningún defecto de este tipo, y que coincide plenamente con los datos de fabricación.

# 3.3.3. PARTÍCULAS TRAZADORAS

Hasta ahora el software no nos da alarmas de que tengamos alguna probabilidad de defecto. Esto nos indica que el software no detecta el proceso físico que ocurre realmente. La defectología que buscamos no está incorporada a la teoría conocida en estos momentos.

Time Fram velo	e: 21.88 ocity magnitude			
	3.77 3.02 2.26 1.51			
	0.76 0.00			
Y				
C.	Prove The Prove States	A CAR AND		States -

Figura 3.12 Simulación fluidodinámica en acero con partículas

opción muy interesante que nos brinda FLOW-3D es el de conocer la trayectoria de una partícula en su recorrido por la pieza antes de solidificar. Esta característica nos permite desarrollar ingeniería inversa y conocer por donde ha pasado cualquier partícula de fluido antes de llegar a ser un defecto.

Como conocemos la posición final de los defectos, lo que vamos a determinar es el recorrido de las partículas dentro de la pieza creando una red de partículas de masa cero. Con este cálculo podemos determinar por donde ha pasado cada una de las partículas de defecto antes de llegar a su posición final. Esto nos permite seleccionar las posiciones de los defectos y realizar el camino inverso para observar de donde podrían generarse los mismos en la pieza Figura 2.5 y Figura 2.6.

La posición inicial de las partículas trazadoras se crea como una malla sobre la pieza en la base de la cara Figura 3.13

Time Frame:	0.00
ř.	

Figura 3.13 Posición de las partículas trazadoras al inicio de la simulación

El software FLOW 3D nos da multitud de posibilidades para visualiza la posición de las diferentes partículas.



Figura 3.14 Registro del recorrido de varias partículas

Como se observa en la Figura 3.15 generar la red de puntos a seguir y verificar en todo momento donde ha estado la partícula y ver que iteraciones con otros elementos ha tenido.







Figura 3.15 Simulación de arrastres de arena y posiciones finales de las partículas trazadoras

Este es una verificación de que los defectos del muñón de la pieza, situada en el lado opuesto a la alimentación, son debidos a arrastres de arena generados por el salto del metal líquido a la entrada de la alimentación.

Pero seguimos sin tener una justificación por CFD de los grandes defectos superficiales que se muestran en la Figura 2.15

### 3.4. DISEÑO DEL EXPERIMENTO

#### **3.4.1. DISEÑO PRELIMINAR**

De toda la familia de piezas que se construyeron en la fundición se escogió el modelo de dimensiones en la cara superficie superior de 3260 mm x 140 mm, por ser la pieza de la que más información y datos se disponían. Es muy importante tener la mayor cantidad de datos del defecto (área del defecto y situación) para poderlo caracterizar y comparar en los ensayos.



Figura 3.16 Medidas de defecto de pieza con situación de defectos y tamaño

Consultada la bibliografía y los clásicos handbook de fundición, se han podido rescatar algunos artículos en los que se trabaja con modelos de sales disueltas en agua y alcoholes. Después de probar algunos de ellos a nivel maqueta, el que mejor resultado dio fue el defendido por el Dr. Ing. Atsumi (Ohno, Solidification. The Separation Theory and

its Practical Applications, 1987). En su trabajo verifica que la solidificación del acero sigue con un modelo de cristalización del cloruro de amonio (NH4Cl). Esta disolución para estudiar la cristalización del acero es muy interesante, ya que hace visual el proceso de llenado y de enfriamiento, pudiéndose ver la formación de los cristales a temperatura ambiente. (0,310 gr por litro de agua=saturada).

Se realizaron varias pruebas a escala 1:1 con esta disolución dando unos resultados óptimos para simular la cristalización.



Figura 3.17 Pruebas realizadas en taller con las sales en el primer modelo

En las pruebas, los cristales de amonio crecían en la superficie de la pieza, incluida la transparente, convirtiéndola en opaca. Este suceso no fue significativo, ya que el llenado se producía antes del comienzo de la solidificación en masa.

Esta situación nos llevó a decidir que, para el estudio de nuestro problema, podíamos prescindir del proceso de solidificación que es representativo del de transferencia de temperatura.



Figura 3.18 En la simulación por CFD se verifica que el llenado es anterior a la solidificación en esta pieza

Nuestro interés es el estudio fluidodinámico y no el proceso termodinámico (cristalización), ya que nuestros defectos no concuerdan con el gradiente térmico que se produce en la pieza. Los patrones de crecimiento de cristales siguen el crecimiento de las perpendiculares a las curvas de temperatura, empezando desde las paredes del molde. Estos patrones no tienen correlación con la defectología encontrada en las piezas, por lo que decidimos realizar las simulaciones solo con agua a temperatura ambiente. El tiempo de llenado es mucha más pequeño que el de crecimiento de cristales (el molde se llena en 56 segundos, la pieza se enfría por debajo de 1400 a partir del 3 minuto y llega a los 400°C en 36 horas).

#### **3.4.2. DISEÑO DEFINITIVO**

Se construyó un modelo nuevo a escala 1:1 con rugosidad superficial similar a la de la arena del molde real (papel de lija) y se verifico que el tiempo de llenado de la pieza cumple con los 56 segundos del proceso real.

Para que la velocidad de llenado coincida con el tiempo de llenado real, se modifica la altura del depósito de agua que alimenta la maqueta. Esto nos da una velocidad de entrada en boquilla igual que en nuestro caso. Condición necesaria para la semejanza, como se explicó en el punto 2.5.2



Figura 3.19 Modelo a escala 1:1 nuevo

Las partículas del fluido son representadas por esferas de diferentes tamaños y densidades. Estas representan diferentes elementos que aparecen en la fundición de acero y que, a través de sus viajes, nos indican de una manera indirecta qué puede estar sucediendo en el modelo fluidodinámico.

Tras la realización de las pruebas, con esferas de diferentes diámetros y densidades, seleccionamos las que mejor imitan los defectos conocidos:

- Las esferas de densidad >1 y diámetro <4 mm representan la arena suelta en todo el proceso.
- las esferas de densidad <1 y diámetro > 4 mm representan la escoria y las supuestas burbujas asociados al efecto Bifilm.
- las esferas de densidad = 1 y cualquier diámetro, representan las partículas de fluido.

El movimiento de estas piezas y su posición al final del proceso simula lo que ocurre en la fundición real. Con la grabación en video se recoge el movimiento en el tiempo de estas partículas y su posición final.



Figara 3.20 Fotograma del video de llenado donde se ven las esferas de simulación



Figura 3.21 Esferas moviéndose en el fluido a medio llenado en el muñón

Se construye un modelo a escala real de la pieza. Como la pieza es simétrica, su comportamiento fluidodinámico también lo es (verificado por la forma y posición de los defectos en la pieza real), con lo que se puede construir un modelo a escala real, cortado por su eje de simetría, y colocarle una tapa de metacrilato para visualizar el flujo y movimiento de las piezas por su interior.



Figura 3.22 Primer prototipo de verificación de ensayos



Figura 3.23 Segundo prototipo y definitivo sistema de ensayo

## 3.4.3. SISTEMA DE ALIMENTACIÓN

Como la superficie del molde es arena, se mide su rugosidad y se recubre la superficie del molde con cinta de lija industrial de igual granulometría. Como el proceso de Bifilm que queremos verificar, se produce en los lugares de mayor velocidad, estos se encuentran en la zona de entrada de la alimentación y en el salto hidráulico (Verificados en la simulación de CFD).



Figura 3.24 Entrada del canal de alimentación

El sistema alimentador de esferas consiste en un tubo unido en vertical a la alimentación principal. Las esferas son absorbidas por efecto Venturi en el agua y por empuje con usillo para asegurar la velocidad de alimentación.



Figura 3.25 Alimentador de esferas

Las velocidades de llenado que se consiguen son de hasta 2.5 m/s en la boca de entrada de la alimentación de la pieza. El volumen del depósito es el mismo que el de la pieza para simular el descenso de la presión de llenado según se va agotando el caldo en la zona de alimentación.

Para que el tiempo de llenado coincida con el del llenado del molde de acero (variable fundamental), se regula la altura de los depósitos de agua hasta que coincidan.



Figura 3.26 Depósitos de agua

# 3.4.4. SELECCIÓN DE LAS PARTÍCULAS TRAZADORAS

Las partículas de diferentes densidades y diámetros se buscan de materiales que no reaccionen con el agua. Encontramos plásticos de diferentes densidades (algunos huecos y otros con carga metálica) que nos permiten simular las partículas que buscamos.

Estas esferas son suficientemente lisas para que puedan fluir sin problemas en el agua sin distorsiones.

Con el software Flow 3D simularemos cada una de estas partículas para verificar la correlación entre software y agua (Figura 3.30).

Material	Ø cm	Densidad
Poliestireno blanco	2.3	<1 (=0,019)
Poliestireno blanco	0,2	<1
Plástico PVC rosa	0.8	= 1
Plástico PVC blanco	1,5	= 1
Plástico PVC naranja	0.8	= 1
Plástico PVC azul	0.9	>1
Plástico cromado	0.9	>1 (=1,9)
Plástico Perla	0.9	>1 (=1,3)
Plástico PVC amarillo	0.6	>1 (=1,42)
Gelatinas colores	1	>1(1,1)

Tabla 3.5 Tabla de materiales, diámetros y densidades de esferas



Figura 3.27 Medidas de esferas

Los elementos de recirculación de agua, recogida de fugas, etc. son sencillos y de fácil construcción. Las fugas en el modelo de agua son poco significativas y son recogidas en un plástico que desemboca a un depósito inferior, que sirve de purgado del sistema y vaciador del experimento cuando ha finalizado. La bomba recircula el agua a los depósitos que hacen de alimentador del experimento.

El número de esferas a introducir se obtuvieron de manera experimental. El proceso consistió en introducir x esferas/segundo hasta que la forma y dimensión del defecto principal real coincidía en tamaño con los defectos formados por las esferas. Esto nos da un factor de relación entre la velocidad de llenado en la pieza y la generación de defecto.



Figura 3.28 Sistema de recogida y bombeo de agua

## 3.5. RESULTADOS DEL MODELO

En el Capítulo 3.1 se recogen las características del modelo numérico que se ha diseñado mediante el software FLOW3D, de forma que a continuación presentaremos las simulaciones realizadas con distintos tipos de partículas trazadoras a fin de poder validarlo después.

# **3.5.1.** PARTÍCULAS DE DENSIDAD = 1

o Simulación en agua



Figura 3.29 Simulación con agua

# • Simulación CFD



Figura 3.30 Simulación CFD

Existe paralelismo entre la simulación del movimiento del agua a T<sup>a</sup> ambiente y el acero líquido a 1600°C, como ya pronosticaron los trabajos del Dr. Atsumi Ohno

# 3.5.2. PARTÍCULAS DE DENSIDAD >1

• Simulación en agua



Figura 3.31 Simulación con agua caso b)

# o En la pieza real



Figura 3.32 Defectos en la pieza caso real b)

Existe correlación entre los defectos encontrados en la pieza, la simulación en CDF y la simulación en agua de partículas de densidad >1 (arenas)

En la Figura 3.33 se simularon arrastres de arena colocados simétricamente para verificar que las posiciones finales corresponden con los defectos encontrados en las piezas. Esto concuerda con la predicción de los ensayos realizados para partículas de densidad >1



Figura 3.33 Detalle de zonas con velocidades mayores de 1 m/s

Para el análisis de los resultados se realizaron una serie de experimentos para cuantificar las variables y relacionarlas.

a. Determinación del momento de inyectar las esferas de densidad >1 (esferas amarillas). Este experimento se realiza para determinar el momento concreto cuando se produce el defecto y el momento cuando debemos introducir las esferas amarillas para realizar la simulación. Los experimentos se realizaron con una muestra de 10 esferas de diámetro 6 mm

Tiempo de llenado	% Coincidencia con zona de defecto	Experimentos
5	100	8
10	100	8
15	70	8
20	20	5
25	0	4
30	0	2
35	0	1
40	0	1
45	0	1
50	0	1
55	0	1
	Total pruebas	40

Tabla 3.6 Ensayos para determinar en qué momento se genera el defecto

Como vemos, las esferas introducidas primero acaban en la posición de los defectos encontrados. Esto nos evidencia que los arrastres de arena son debidos al golpe de ariete contra la arena del molde en el instante inicial

b. Cantidad de esferas a inyectar. Variable: coincidencia en área con la del defecto. Se usaron esferas de PVC amarillo de 6 mm lanzadas en los 13 primeros segundos según experimento anterior.

Número de esferas	% Coincidencia área y tamaño de defecto	Experimentos
20	0	1
30	0	1
40	0	2
50	40	4
60	100	5
70	100	5
80	35	5
90	0	4
	Total pruebas	26

Total pruebas

Tabla 3.7 Toma de datos experimento 2

Este diseño de experimento nos muestra cómo se produce la arena y en que cantidades para este proceso concreto. Como no es objeto de este estudio los arrastres de arena, abandonamos los ensayos en el modelo.

#### PARTÍCULAS DE DENSIDAD <1 3.5.3.

o Simulación en agua



Figura 3.34 Simulación en agua

o Simulación en CFD.

El software no permite hacerlo al no contemplar este tipo de defectología nueva. Las escorias no se simulan por su complejidad de comportamiento y por depender de variables no parametrizables (limpieza molde, ppm de composición metalúrgica, reacciones químicas, ...). Para las simulaciones siempre se suponen condiciones ideales de trabajo. El efecto Bifilm no se contempla tampoco.

• En la pieza real



Figura 3.35 Defecto en la pieza real caso c)

Existe correlación entre los defectos encontrados en la pieza y la simulación en agua de partículas de densidad <1

Para el análisis de los resultados se realizaron una serie de experimentos para cuantificar las variables y relacionarlas.

a. Determinación del momento de inyectar las esferas de densidad <1 (esferas blancas). Este experimento se realiza para determinar el momento concreto cuando se produce el defecto y el momento cuando debemos introducir las esferas blancas para realizar la simulación. Tenemos 2 diámetros diferentes de esferas del mismo material para ver cuales definen mejor el proceso.

Se usaron 100 esferas de poliestireno blanco de diámetro 3 mm para comprobar cuando se produce el fenómeno Bifilm.

Vemos que la coincidencia entre la zona del defecto y donde van las esferas es muy alta durante todo el proceso de llenado. Esto parece debido a la alta velocidad de llenado en todo el proceso. Esta solo cambia en los momentos finales donde la velocidad cae en todo el conjunto del fluido.

Tiempo de llenado	% Coincidencia en zona de defecto	Experimentos
5	100	5
10	100	5
15	100	5
20	100	5
25	100	5
30	100	5
35	100	5
40	80	5
45	50	5
50	20	4
55	0	3
	Total pruebas	52

Tabla	3.8	Tabla	experimento	3

b. Cantidad de esferas a inyectar. Variable: % coincidencia en área y forma con la del defecto

Numero de esferas	% Coincidencia área y forma de defecto	Experimentos
2500	0	1
5000	0	1
7500	0	1
10000	40	3
12500	80	5
15000	100	5
17500	100	5
20000	100	5
22500	60	5
25000	40	5
27500	30	5
30000	20	5
32500	10	3
35000	0	3
37500	0	1
40000	0	1
	Total pruebas	54

Tabla 3.9 Tabla experimento 4

Numero de	% Coincidencia	
esferas	área de defecto	Experimentos
50	0	2
100	0	2
150	0	5
200	50	5
250	100	5
300	100	5
350	100	5
400	50	5
450	0	5
500	0	2
550	0	2
600	0	1
650	0	1
700	0	1
750	0	1
800	0	1
	Total pruebas	48

Tabla 3.10 Experimento 5

Estos datos nos dicen la velocidad de creación de Bifilm a esa velocidad de llenado.
## 3.5.4. PARTÍCULAS MEZCLADAS

### o Simulación en agua



Figura 3.36 Simulación en agua caso d)

• En la pieza real es la suma de todos los defectos en superficie

Las imágenes son captadas por cuatro cámaras superpuestas, que captan el movimiento del conjunto por tramos, de manera que podemos ver el proceso real de llenado con todos los fenómenos que se producen en estas piezas.



Figura 3.37 Superposición de video y simulación CFD de las partículas

Las pruebas realizadas son una mezcla de las anteriores y no aportan nada nuevo al estudio

# RESULTADOS

#### 4. RESULTADOS

El proceso que sufre el acero para tener este tipo de defecto es nuevo y solo lo conocemos cualitativamente en un caso con parámetros muy concretos. Desconocemos las variables que entran en juego, pero si conocemos la principal que es la velocidad a partir de un umbral ( $\approx 1m/s$ ).

Para poder cuantificarlo, necesitaríamos unos cuantos casos con geometría distinta y a diferentes velocidades de entrada. Con la nube de datos podríamos hacer una primera correlación donde la constante obtenida, sería la suma de otros factores que habría que seguir investigando. Desgraciadamente nosotros solo disponemos de una sola geometría con un solo tipo de defectos, con lo que solo podemos obtener un punto de esa gráfica de regresión. Nuestro trabajo está centrado en evidenciar su existencia en el acero a altas velocidades y su detección en taller con métodos simples.

#### 4.1. DIMENSION DEL EXPERIMENTO

#### 4.1.1. MODELO FÍSICO

El experimento se repitió más de 60 veces para parametrizar las variables en el primer modelo y verificar que no necesitábamos ningún tipo de sal disuelta. Se repitió otras 60 veces con el segundo modelo, para afinar los parámetros del experimento y ajustar el modelo físico. Se repitió otras 290 veces en el segundo modelo para tomar resultados y compararlos con los del software Flow-3D. Adicionalmente a estos experimentos, se repitieron ensayos sin toma de datos para dar la seguridad y fiabilidad al equipo investigador.

Durante los experimentos de ajustes de parámetros, se verifico que la escala 1:1 era la que nos daba buenos resultados comparando con piezas reales y que se cumplía la teoría de correlación explicada en el punto 2.5.2. Se intento un modelo a escala 1:0.5, pero no resulto satisfactorio. No se supo interpretar los problemas que aparecieron de escalas e incurría en más costes de producción en fabrica. Como el objetivo es buscar un modelo sencillo para taller, se descartó seguir investigando esta vía y se centraron los recursos a la escala 1:1.

El experimento se realizó 290 veces en el segundo modelo de agua y se compararon los resultados con los de CFD y con los datos que teníamos reales en pieza.

- 70 veces con esferas de densidad 1 (para fiabilidad del proceso)
- 66 veces con esferas de densidad >1 (para entender el arrastre de arena)
- 154 veces con esferas de densidad <1 (para entender y visualizar el Bifilm)

Cada día se pudieron realizar 2 experimentos con los medios técnicos disponibles, ya que el secado, limpieza y ajustes del modelo conllevan varias horas.

Las simulaciones se realizaron en diferentes condiciones (normales de taller en País Vasco de temperatura y humedad) no teniendo cambios apreciables en los resultados. también se simularon diferentes partículas para conseguir el marco estable y más parecido a lo que se encontró en la realidad

#### 4.1.2. MODELO NUMÉRICO

Para los cálculos de llenado y solidificación del modelo numérico han necesitado en tiempo de cálculo:

- Llenado 1 día: 16 horas: 13 minutos:47 segundos
- Solidificación 8 horas: 55 minutos: 41 segundos

Estas simulaciones matemáticas se realizaron 6 veces para verificar la estabilidad de los resultados. El software ha demostrado ser muy estable y versátil.

Adicionalmente se realizaron 2 cálculos numéricos para velocidades menores de 1 m/s y alimentación inferior (Figura 2.3), dando resultados coincidentes a la realidad (no defectos)

#### 4.2. ENSAYOS EN MODELO AGUA

De los datos para esferas de densidad igual a uno no nos aportan información relevante. Ya sabemos que para velocidades <1 m/s los resultados experimentales y los reales coinciden

Los datos de esferas de densidad >1 (arenas) nos demostraron, por su posición final, que coinciden perfectamente con los defectos encontrados en las piezas reales (Figura 3.5.4.1Figura 3.36 y Figura 3.37). Estos defectos pueden ser detectados específicamente a posteriori, si conocemos las posiciones de los defectos con arena en la pieza. Como dijimos anteriormente, la existencia o no de defecto, depende de muchos factores relacionados con la integridad de la arena en el molde y no son parametrizables. (compactación manual adecuada, humedad relativa, secado de llama homogéneo, ...).

La única variable parametrizable sería el golpe de ariete contra la pared del molde, y esta no puede ser simulada en este tipo de experimentos. Los datos de la Figura 3.3 nos cuentan que el defecto se produce justo al comienzo del llenado, con lo que podemos decir que se debe al fuerte flujo de rozamiento, o en la entrada de la alimentación o en el golpe del salto hidráulico. La Tabla 3.5 nos da la cantidad de arena generada en estas condiciones y cuyo valor optimo este alrededor de las 65 esferas de 6 milímetros de diámetro.

Los datos más interesantes son los de esferas de densidad <1 (Bifilm). Estos datos nos evidenciaron por su posición final, que coinciden perfectamente con los defectos encontrados en piezas reales (Figura 3.4).

En la búsqueda del valor que pueda cuantificar la cantidad de Bifilm generado a esa velocidad y esa geometría, tenemos que el defecto se producía con mayor fuerza hasta los 35 segundos de comenzar el llenado y con velocidades de hasta 2,1 m/s como se ve en Figura 3.34. Después decrece rápidamente al caer la velocidad en las últimas fases del llenado. La cantidad de defecto generado es óptima alrededor de las 17500 esferas de 3 mm. (ver Tabla 3.7)



Figura 4.1 Posición de las arenas (20 mm diámetro)

Con menos esferas no se cubre bien el área del defecto real, y con más se excede esa zona de defecto. Se realizaron experimentos con esferas de 23 mm de diámetro para dimensionar en un primer momento las zonas afectadas, pero el diámetro que mejor ha funcionado ha sido el de 3 mm. La Tabla 3.6 nos da el tiempo durante el cual se genera el Bifilm y que coincide en los 35 primeros segundos del llenado, cayendo muy rápidamente después. Como se puede ver, el tiempo en que se genera el Bifilm coincide en ambos diámetros de esfera y coincide con los momentos de máxima velocidad de llenado.



Figura 4.2 Posición de las arenas

## 4.3. COMPARACIÓN ENTRE LOS ENSAYOS NUMÉRICOS Y EXPERIMENTALES

Detallamos a continuación la correlación de los resultados obtenidos entre los diferentes experimentos:

Densidad	CFD	Experimento	Realidad	Coincidencia
= 1	and the second sec		Pieza sana	No aporta datos nuevos
>1				98 %
<1				100 %

Tabla 4.1 Resultados

Como se puede observar las partículas, de densidad = 1 que simulan el acero líquido, se correlacionan perfectamente con el modelo CFD. No aporta información.

No ocurre así cuando las partículas que aparecen son de densidad <1 o >1. Los softwares en general no son capaces de generar esta simulación porque no lo implementan como parte del proceso. Flow-3D tiene una rutina para simular arenas. Este modelo numérico es insuficiente en la actualidad, ya que no está modelizado el golpe de ariete del acero fundido o los efectos de erosión a alta velocidad, variables fundamentales en los arrastres de arena. Para partículas de densidad >1, sería interesante que el software lo incorporase, con objeto de diseñar trampas para arenas y poder simularlas.

Aunque cuantificar las arenas de un molde es imposible porque dependen de procesos manuales y de la cultura de trabajo, sí sería interesante que se incorporasen para ayudar al diseñador a darles salida en caso de producirse y conseguir piezas sanas. Mediante el software podemos determinar donde la presión y velocidad ferrostática es mayor y calcular por ensayos en taller, los factores de erosión y rotura de la arena. Además, es importante que se puedan definir zonas de arrastre de arena discretas, para estudios detallados (por el momento se hace de manera generalizada).

Para partículas de densidad <1, que es donde se encuentra el grueso del estudio, nos preguntamos lo siguiente: ¿De dónde vienen si no se pueden producir en el molde ni en la cuchara?,

Esto evidencia que se produce algún fenómeno fisicoquímico que acompaña al fluidodinámico a esas velocidades >1 *m/seg* 

Cuando se revisa la bibliografía no se encuentran referencias a velocidades de alimentación mayores a 1 m/s a excepción del trabajo de J. Champbel (Campbell, 2013) donde se hace referencia a un fenómeno a estas velocidades en aluminio, y que denomina Bifilm. Este fenómeno habla de la formación de óxidos en regímenes muy turbulentos (altas velocidades). Podríamos visualizar mejor el proceso de formación de este defecto si imaginamos una "cavitación" en el flujo fundido.

En el caso que nos ocupa, estas se producen en acero a partir de 1 m/s, y generan una oxidación puntual de la superficie del acero líquido, que se pliega sobre si misma a gran velocidad por la turbulencia generada. Dada la virulencia del flujo, esta no puede disolverse en el acero. En estas piezas de estudio, la casualidad hace que la geometría y la alimentación especial, maximicen los efectos de los defectos de oxidación en régimen turbulento, haciéndoles óptimos para el seguimiento de este fenómeno. El fenómeno se incrementa por tener la alimentación un salto de cascada.



Figura 4.3 Diagrama de velocidades durante el llenado



Figura 4.4 Durante todo el proceso de llenado la zona de alimentación supera los 2 m/s

Comprobando las simulaciones de la Figura 4.3 y Figura 4.4, vemos que la generación de flujo turbulento es constante y el área expuesta es muy amplia, con lo que el tiempo y el espacio para formarse el Bifilm es muy amplio.

Este análisis experimental demuestra que la teoría de Bifilm es correcta y concuerda perfectamente con los datos experiméntales. El flujo fuertemente turbulento de la entrada provoca un contacto íntimo entre el metal y el aire, provocando la formación de largas burbujas en forma de globos (esferas de densidad <1).



Figura 4.5 Creación de Bifilm (Campbell, 2013)



Figura 4.6 Forma de las burbujas Bifilm

Como estos nuevos óxidos son de temperatura de fusión mayores a la del acero, ascienden rápidamente a la superficie de llenado, no teniendo tiempo suficiente para fundirse de nuevo, acumulándose en ella.



Figura 4.7 Resultados del modelo de agua



Figura 4.8 Posicionamiento en superficie sobre la pieza real

Normalmente este fenómeno se produce en pequeño tamaño (zonas concretas de piezas donde la velocidad es grande), en agrupaciones que históricamente se confundían con porosidades u otras familias de defectos. Nunca se analizaba la velocidad de llenado

en esa zona o en el conjunto de la pieza, ya que el límite histórico en taller se consideraba menor 1 m/s, y en el llenado de zonas estrechas, se sacrificaba la velocidad de llenado para evitar uniones frías.

En resumen, Flow-3D (ni ningún otro software) tiene todavía este tipo de cálculos. Esto se debe a que nos encontramos en un momento temprano de estudio del fenómeno, donde somos capaces de determinarlo cualitativamente pero no cuantitativamente.

# CONCLUSIONES Y FUTUROS TRABAJOS

## 5. CONCLUSIONES Y FUTUROS TRABAJOS

La falta de justificación teórica en el conocimiento tradicional de la fundición sobre las velocidades máximas de alimentación, o la velocidad máxima de llenado en ciertas áreas de la pieza, ha generado siempre mucha controversia teórica y práctica. La sabiduría popular había conseguido acotar el fenómeno, pero se desconocían las causas físicas del mismo para poderlo controlar. Con la teoría de Bifilm existe una explicación teórica de la física del problema. Con este trabajo se verifica la existencia de este fenómeno en piezas de acero, con lo que suponemos que se podrá extrapolar a otros metales en estado líquido a altas temperaturas.

Esta teoría es todavía cualitativa y no cuantitativa para que pueda ser introducida en las ecuaciones de CFD de los softwares, pero se podría incorporar a una nueva línea de investigación, que podría tener una repercusión económica directa en la industria de la fundición.



Figura 5.1 Correspondencia entre llenado de una placa de aluminio (RX) y su simulación en CFD

Como se muestra en la Figura 5.1, el software representa muy bien el movimiento fluido dinámico del metal líquido, pero no recoge el fenómeno que se produce en su superficie. Despreciable a velocidades menores de 0,5 m/s pero protagonista a velocidades mayores de 1 m/s, ya que las capas de oxido son introducidas dentro del metal y no quedan solo en su superficie.

#### 5.1. CONCLUSIONES

Retomando los objetivos de este estudio, enunciados en 1.3, podemos responder, a nivel general, los siguientes apartados:

# a) A nivel teórico poder explicar el proceso físico que se produce en piezas donde un eje es mucho mayor a los otros:

El proceso que se produce a esas velocidades de llenado es independiente de la geometría de la pieza y de su disposición. Solo depende del régimen turbulento en el que se encuentra el fluido en contacto con la atmosfera. En nuestro ejemplo de estudio, lo que ocurre es que el fenómeno encuentra las condiciones óptimas para aparecer, ya que le damos velocidad, régimen muy turbulento, salto de cascada y gran superficie para que se manifieste en todo su esplendor con defectos de 3 metros de longitud y entre 20 y 40 cm de anchura.

Conclusión: El tamaño no es relevante para el fenómeno de Bifilm.

# b) A nivel teórico poder explicar el proceso físico que se produce en piezas donde las velocidades de alimentación son mayores a 1 m/s y que la sabiduría de taller ponía como barrera:

Conseguimos encontrar en los estudios de la teoría Bifilm en aluminio una respuesta coherente y adecuada cualitativamente a la defectología encontrada. La teoría de Bifilm encaja perfectamente en las experiencias realizadas en agua y con esferas de densidad menor que 1, y le da una explicación teórica que hace que confirmemos este proceso fisicoquímico en el acero. Conseguimos encajar la teoría en la experiencia práctica de llenado de moldes, dando sentido físico al límite de velocidad de llenado del molde. Esta ley de taller, de no alimentar por encima de 1 m/s, tiene ahora su encaje académico con la teoría de Bifilm.

Conclusión: a velocidades >1 m/s se produce el efecto físico denominado Bifilm.

# c) Eliminar defectos en fundiciones de gran tamaño mediante la predicción por simulación:

Tomando la limitación practica de 1 m/s, se puede incorporar en los softwares de simulación de CFD alertas o zonas de posible creación de Bifilm. Esta incorporación en la programación no es sencilla, pero se puede acotar en parte en las gráficas de velocidad. El propio ingeniero de fundición puede poner esta comprobación en su checklist. Conclusión: Crear alertas en el software a velocidades >1 m/s

#### d) Validar la simulación con agua a escala 1:1 de metal fundido antes de solidificar:

Dado que en estos momentos la teoría de Bifilm no es capaz de dar cuantitativamente el tamaño y cantidad de los defectos, se pueden usar modelos a escala 1:1 en agua para analizar esas zonas de velocidad mayor de 1 m/s con esferas de poliestireno de densidad menor de 1 y diámetros entre 2 y 20 mm. Este es un método sencillo, rápido y muy barato para la industria, ya que usa materiales típicos de uso en fabricación para piezas grandes (>3 Tm). Los modelistas encargados de realizar el modelo en madera pueden usar el mismo para adaptarlo al experimento sin grandes extra costes. De esta manera se pueden diseñar áreas donde dirigir el defecto para su fácil eliminación mecánica posterior.

Conclusión: Fácil y económica implantación en taller.

### e) Demostrar que el comportamiento de partículas esféricas de diferentes densidades en este fluido se correlaciona con la simulación de partículas sin masa de los softwares CFD y los defectos en pieza:

Las esferas de poliestireno en agua han demostrado su versatilidad en la identificación de defectos por Bifilm. Para estos óxidos, las zonas de aparición y trayectorias son bien reflejadas por ellas, haciendo visible su aparición especialmente en las zonas de alimentación. Las esferas identifican al 100% a los Bifilm cualitativamente. Esto nos puede servir como modelo para desarrollar el modelo matemático de CFDs en próximos trabajos. Cuantitativamente es necesario repetir experimentos como este y comparar la pieza real con el modelo. Conociendo que la geometría es independiente del proceso físico, se pueden realizar experimentos en piezas planas y largas, con diferentes velocidades de llenado y cuantificar con esferas la cantidad de defecto que corresponde a cada velocidad.

Conclusión: Las esferas de densidad <1 pueden representar el fenómeno de Bifilm.

A nivel más específico podemos decir:

#### f) Encontrar donde la simulación CFD no cubre esta área de defectología:

Como se ha mencionado anteriormente, todavía los modelos CFDs no incorporan esta problemática. Hemos analizado las ecuaciones de Flow-3D, y consultado con otros fabricantes de softwares, y vemos que la teoría Bifilm afecta profundamente a su estrategia de resolución del llenado. Esto se hace más crítico a velocidades a partir de 0.8 m/s. Flow-3D, en su metodología para interpretar superficies libres, hace la suposición de que el metal liquido está rodeado de aire inerte para reducir el esfuerzo computacional. Como dice la teoría de Bifilm, la superficie del metal liquido está rodeada de una capa entre 0.3 y 1 mm de óxidos que se autogenera en cada avance de ola. Para definir las zonas Bifilm, casi siempre porosas, necesitamos usar el modelo de defectos porosos delgados en vez de la suposición de estar rodeada de aire inerte en la capa limite, tal y como se aplica en las ecuaciones de movimiento (Flow 3D Science, 2017). A partir de esta corrección en la ecuación de movimiento en las zonas de creación de Bifilm, podríamos usar el modelo de regiones de vacío de presión variable para analizar su evolución. Se podría asimilar la concha Bifilm a una burbuja de región vacía (Flow 3D Science, 2017) unidas al fluido a través de un deflector. Este movimiento habría de compararse con el del modelo de deriva (Flow 3D Science, 2017) para ver cuál define mejor su evolución. Hemos de usar el modelo de residuo en la superficie de estas regiones de vacío para conocer su disolución o concentración. También podríamos ayudarnos con el modelo de espuma metálica (Flow 3D Science, 2017) para la verificación de creación de Bifilm, aunque este modelo ha de recoger la teoría Bifilm cuantitativa, que aún no está desarrollada.

# g) Construcción de modelos a escala 1:1 donde se pueda simular con agua el proceso real:

La construcción de nuestro modelo de agua a escala 1:1 ha dado resultados experimentales totalmente ceñidos a los resultados reales en producción. Esto nos avala la metodología de ensayo para prototipos. Estos son fáciles de construir en madera, PVC y plásticos rígidos, materiales usados por los modelistas habitualmente en fundición. Son de construcción rápida y fácilmente modificables en caso de tener que modificar las entradas de alimentación para volver a validar las suposiciones de diseño. Es necesario que sea a escala 1:1, para que los resultados en el modelo de agua sean fácilmente interpretables y evitar la transformación adimensional que pueden llevar a resultados confusos de difícil interpretación en producción. De hecho, el propio modelo de fundición nos puede servir.

## h) Validación de resultados experimentales en medio acuoso para verificar lo que ocurre en el metal líquido:

Las esferas de materiales de densidades similar al agua nos permiten visualizar el recorrido y posición final de las diversas partículas y defectos que protagonizan el proceso de fundición. Esferas comerciales de diámetros hasta 1 cm nos permiten apreciar, sin distorsionar el flujo, el sutil movimiento de las partículas de metal en el proceso de llenado y localizar las posibles zonas de acumulación de defecto. Esta información nos ayuda a crear zonas de concentración de defecto para su fácil eliminación mecánica posterior.

#### i) Bajar coste de proceso por el uso de simulación previa en medio acuoso:

Una de las partes más importantes para un trabajo de este tipo, es la aplicación práctica de este tipo de soluciones en producción. Todos los materiales que hemos usado son comerciales, de fácil manejo y montaje y de precios muy accesibles en producción. Se atacan las 2 variables de negocio críticas, coste y tiempo de manera directa y efectiva Podemos buscar con el software de CFD los puntos de la alimentación donde se producen estas velocidades mayores de 1 m/s y modificar la alimentación del molde en consecuencia, reduciendo los costes de pruebas y reparaciones. Los plazos de entrega se pueden reducir considerablemente. Este es un nuevo punto de control en el proceso de fabricación.

### 5.2. TRABAJOS FUTUROS

Se nos ocurren varias líneas de investigación

- a) Realizar este mismo experimento con otros metales fundidos para comprobar que el fenómeno físico es independiente del metal usado.
- b) Con la metodología validada, podríamos determinar la velocidad de creación de Bifilm. Para ello deberíamos usar un modelo real de fundición estrecho y de larga sección, y compararlo con el modelo de esferas de poliestireno de 3 mm. Podemos generar velocidades de llenado desde 0,5 hasta 3 m/s y compararlas con el modelo de esferas. Comparando los defectos a diferentes velocidades con el número de esferas necesario para imitarlo, podemos sacar el gradiente de generación de Bifilm. Este hecho es relevante, ya que de él podemos sacar las ecuaciones y factores que introducir en software de CFD.

#### REFERENCIAS

Alexander, P. (2016). SDP Memo 025: Updated SDP Cost Basis. Retrieved from http://ska-sdp.org/sites/default/files/attachments/ska-tel-sdp-

0000091\_c\_rep\_updatedsdpcostbasisofestimatejune2016.pdf

Asociacion Española de Fundidores. (2016). Consumo de fundicion en el mundo.

Campbell, J. (2013). Complete Casting Handbook. Oxfrord: Elsevier.

- Chvorinov, N. (1954). Crystallization and heterogeneity of steels. NČSAV.
- Connor, N. (2019, 9 17). https://www.thermal-engineering.org/. Retrieved from https://www.thermal-engineering.org/es/cual-es-el-numero-prandtl-de-metales-liquidos-definicion/
- Crepeau, M. T. (2011). Shape Casting: 4th International Symposium 2011. The Minerals, Metals & Materials Society.
- Dipak Mazumdar, J. W. (2010). MODELING OF STEELMAKING PROCESSES. CRC Press.

Engieneers Edge. (2021, 05 01). www.engineersedge.com. Retrieved from https://www.engineersedge.com/fluid\_flow/kinematic-viscosity-table.htm Ernest&Joung. (2016). Global Steel.

- Eudoxio Ramos Gomez, R. Z. (2013). Physical Modeling of Fluid Flow in Ladles of Aluminum Equipped with Impeller and Gas Purging For Degassing. The Minerals, Metals & Materials Society and ASM International, VOLUME 44B 974-983.
- European Foundry Association. (2010). Cost casting statictis.
- European steel association . (2016). Outlook.
- Fang, C. (2019). An Introduction to Fluid Mechanics.
- Fernandez, J. (2012). Tecnicas numericas en ingenieria de fluidos. Reverte.
- FLOW 3D. (2021, 05 01). FLOW 3D. Retrieved from https://www.flow3d.com/flow3dv12-training/
- Flow 3D Science. (2017). Flow 3D Users manual.
- Flow Science. (2008). FLOW-3D user manual version 9.3. www.flow3d.com: Flow Science, Inc.
- Francis H. Harlow, J. E. (1965). Numerical calculation of time-dependent viscous Incompressible flow of fluid with free surface. The phisics of fluids, 2182-2189.
- Furumoto, T. U. (2012). Finishing performance of cooling channel with face protuberance inside the molding die. Journal of Materials Processing Technology, 212: 2154-2160.
- Harlow, F. H. (1964). The particle-in-cell computing method for fluid dynamics. Methods Comput. Phys. 3, 319–343.
- Hirt, C. N. (1981). Volume of fluid (VOF) method for the dynamics of free boundaries. J Comput Phys, 39:1-11.
- Hirt, C., & Nichols, B. (1981). Volume of Fluid (VOF) Method for the Dynamics of Free Boundaries. Journal of Computational Physics, 39, 201.
- Hirt, T. (n.d.). Flow 3D CDF-101. Retrieved from https://www.flow3d.com/resources/cfd-101/
- Hua Bai, B. G. (2001). Turbulent Flow of Liquid Steel and Argon Bubbles in Slide-Gate Tundish Nozzles. METALLURGICAL AND MATERIALS TRANSACTIONS B, VOLUME 32B, APRIL 2001—253.
- HURST, S. (1996). METAL CASTING, Appropriate technology in the small foundry.

- Jing Jiang, J.-s. L.-j.-f.-y. (2010). Water modeling of molten steel flow in a multi-strand tundish with gas blowing. International Journal of Minerals, Metallurgy and Materials, Volume 17, Number 2, April 2010, Page 143.
- Julian Szekely, O. J. (1989). The Physical and Mathelllatical Modeling of Tundish Operations. Springer Verlag.
- Kármán, T. v., & Biot, M. A. (1940). Mathematical Methods in Engineering; An introduction to the Mathematical Treatment of Engineering Problems.
- Kolmogórov, A. (1933). Grundbegriffe der Wahrscheinlichkeitsrechnung. Springer.
- Kumar, A. M. (2008). Modeling of Fluid Flow and Residence Time Distribution in a Four-strand Tundish for Enhancing Inclusion Removal. ISIJ International , Vol 48, 38–47.
- Leonid F Kozin, S. H. (2013). Mercury Handbook. Cambridge UK: The Royal Society of Chemistry.
- Mclean, A. (1987). Course Notes on Tundish Metallurgy for Iron and Steel Society. Toronto.
- Modeling of Fluid Flow and Residence Time Distribution in a Four-strand Tundish for Enhancing Inclusion Removal. (n.d.).
- Necker, F. H. (2002). High-resolution simulations of particle-driven gravity currents. Int J Multiphase Flow, 28: 279-300.
- Ohno, A. (1987). Solidification. The Separation Theory and its Practical Applications. Springer-Verlag.
- Ohno, A. (1987). Solidification: The Separation Theory and its Practical Applications. Springer-Verlag.
- Pan, Y. a. (2002). Physical and Mathematical Modelling of Thermal Stratification Phenomena in Steel Ladles. ISIJ International, 42, 53.
- Patankar, S. V. (1980). Computation of Conduction and Duct Flow Heat Transfer. Taylor & Francis Ltd.
- Prandtl, L. (1931). Guide through Fluid Mechanics.
- R. Sanchez, R. M.-C. (2003). A Physical Model for the Two-phase Flow in a Continuous. ISIJ International, Vol. 43 (2003), No. 5, pp. 637–646.
- Richardson, L. F. (1932). Weather Prediction by Numerical Process. Cambridge Mathematical Library Series.
- Rywotycki, M. (2014). Modelling liquid Steel motion caused by electromagnetic stirring in continuous casting steel process. Metallurgy and Materials.
- Sigworth, G. (2018). Solidification and Castability of Foundry Alloys.
- Spalding, S. P. (1972). A calculation procedure for heat, mass and momentum transfer in three-dimensional parabolic flows. International Journal of Heat and Mass Transfer, 1787-1806.
- Steel European association. (2016). Productividad de la fundición europea. Statistics.

(2019). Steel statistic year book. World Steel Association,.

- Stetsenko, V. Y. (2012). МЕТОДИКА ФИЗИЧЕСКОГО МОДЕЛИРОВАНИЯ ГИДРОДИНАМИЧЕСКИХ ПРОЦЕССОВ ПРИ ЛИ¬ТЬЕ СПЛАВОВ. Литье и металлургия.
- (2008). Study on the Copetitiveness of the European Steel Sector. Within the Framework Contract of Sectorial Competiviness studies ENTR/06/054.
- Sutherland, B. K. (2004). Intrusive gravity currents in two-layer fluids. J Fluid Mech, 514: 327-353.

- Taylor, G. I. (1935). Statistical theory of turbulence. Proceedings of the Royal Society of London. Series A, Mathematical and Physical Sciences.
- The engineering toolbox. (2021, 05 01). Retrieved from Dynamic Viscosity of some common Liquids: https://www.engineeringtoolbox.com/absolute-viscosity-liquids-d 1259.html

Tropea, Y. F. (2008). Handbook Experimental Fluid Mechanics.

Ungarish, M. (2009). An introduction to gravity currents and intrusions. CRC Press.

Wlodawer, R. (1966). Directional Solidification of Steel Casting. Pergamon Press.

Yue Qiang, Z. Z.-s.-f. (2009). Water Modeling of Swirling Flow Tundish for Steel Continuous Casting. JOURNAL OF IRON AND STEEL RESEARCH, INTERNATIONAL, 16(5): 17-22.

#### BIBLIOGRAFIA

- 1. A Ramos, R. Sanchez, "Mathematical Simulation and Physical Modelling of Unsteady Fluid Flows in a Water Model of a Slab Mold" 460—VOLUME 35B, JUNE 2004, metallurgical and materials transactions B
- 2. A.Ohno, The formation of cast structure, Springer 1987
- Anglada, E.a, Meléndez, A.a, Maestro, L.b, Domiguez, I.b "Adjustment of numerical simulation model to the investment casting process "Volume 63, 2013, Pages 75-83
- 4. ASM International. Handbook Committee. ASM Handbook: Properties and Selection: Nonferrous Alloys and Special-purpose Materials. volume 2 of Metals Handbook. ASM International, 1990
- 5. ASM Metal handbook 15 Casting simulation, 2014
- 6. B. LeMehaute. An introduction to hydrodynamics and water waves. Springer-Verlag, 1976.
- 7. British Cast Iron Research Association. Foundry technology for the '80s: 3 april-5 April 1979, university of warwick. Birmingham, England: Bcira; 1979:368.
- 8. C. Tropea, A. Yarin, J. Foss, "Handbook of experiemental fluid dinamics", Springer 2007
- 9. C. W. Hirt and J. M. Sicilian. A porosity technique for the definition of obstacles in rectangular cell meshes. September 1985
- 10. C. W. Hirt. Identification and treatment of stiff bubble problems. Technical Note: TN-36 on http://www.flow3d.com, September 1992. Flow Science Edition
- 11. C. W. Hirt. Particle-fluid coupling. Technical Note: TN-50 on http://www.flow3d.com, June 1999. Flow Science, ed
- 12. C. W. Hirt. Simplified solution algorithms for fluid flow problems. Numerical Methods for Partial Differential Equations Seminar, 1978
- 13. Campbell HL. Manual of foundry principles and practice .. Ann Arbor, Mich.: ; 1924.
- 14. Campbell J. Castings. In : Castings. 2003:1-337. Accessed 4 December 2018. 10.1016/B978-0-7506-4790-8.X5016-5.
- 15. Campbell J. Complete casting handbook: Metal casting processes, metallurgy, techniques, and design: Second edition. In: Complete casting handbook: Metal casting processes, metallurgy, techniques and design: Second edition. ; 2015:1-1028.
- 16. Campbell J. Crack populations in metals. AIMS Mat Sc. 2016;3(4):1436-1442.
- 17. Campbell J. Discussion on "Observation of the mold-filling process of a large hydro-turbine guide vane casting". Metal Mat Trans B Process Metal Mat Process Sci. 2015;46(5):2018.
- 18. Campbell J. The concept of quality in castings. Foundry Trade J. 2010;184(3679):274-276.
- 19. CFD Modeling and Simulation in Materials Processing 2018, Conference proceedings, TMS 2018
- 20. CursofundiciónAzterlan 1999
- 21. Ekey DC, Winter WP. Introduction to foundry technology. New York: McGraw-

Hill; 1958:296.

- 22. El-Sayed MA. The behaviour of Bifilm defects in cast al-7Si-mg alloy. PLoS One. 2016;11(8):e0160633. doi: 10.1371/journal.pone.0160633 [doi].
- 23. G. K. Batchelor. An Introduction to Fluid Dynamics. Cambridge University Press, 1983.
- 24. Gibb WK, Campbell GD, Mortenson R, American Foundry Society Washington Chapter. The fiery furnace: A history of the foundry industry in king county and the puget sound region. Kirkland, Wash.: Sundial Press; 2011:194.
- 25. Glicksman, M. E. (2011). Principles of solidification: an introduction to modern casting and crystal growth concepts. Springer
- 26. H.E. Boyer, T.L. Gall, and American Society for Metals. Metals Handbook: Desk Edition. American Society for Metals, 1985
- 27. Hartley LA, Bremer E, Dwyer P. Elementary foundry technology. 3d , ed. Cleveland, O.: The Penton Publishing Co.; 1941:390.
- 28. Hermanns H. Techno-diktionär der praxis und wissenschaft der hüttenmännischen und giessereiverfahren, der industriellen verarbeitung und prüfung der wichtigsten roh-, halb- und fertigstoffe. 3 erweiterteAufl ed. Halle Salle: W. Knapp; 1950.
- 29. I. Aguirre, A. Muro, "Fabricación de piezas sanas de acero moldeado", Revista Fundición 1968.
- 30. J. Campbell, "Castings The New Metallurgy of Cast Metals 2Nd Ed", Butterworth 2003)
- 31. J. Duponchelle, "Manual del fundidor", Gustavo Gili, 1932
- 32. J. Fernandez, M. Fernandez, M. Tovar, "Mejora de la calidad de las piezas fundidas", Comité internacional de las asociaciones técnicas de fundición, 1974
- 33. J. Sopcak, "Handbook of investment casting", Gem Guides book company 1986
- 34. J. D. Fenton. The numerial solution of steady water wave problems. Comput. Geosci., 14(3):357–368, April 1988
- 35. J. E. Welch, F. H. Harlow, J. P. Shannon, Los Alamos Scientific Laboratory, and B. J. Daly. The Mac Method: A Computing Technique for Solving Viscous, Incompressible, Transient Fluid-flow Problems Involving Free Surfaces. LA-3425. Los Alamos Scientific Laboratory of the University of California, 1966.
- 36. J. M. Sicilian. Addition of an extended bubble model to FLOW-3D. Flow Science report (TP-2-94), March 1994. Flow Science, ed.
- 37. Jarfors AEW, Seifeddine S. Metal casting. In: Handbook of manufacturing engineering and technology. ; 2015:309-410
- 38. Jezierski J, Dojka R, Janerka K. Optimizing the gating system for steel castings. Metals. 2018;8(4).
- 39. Junke Guo. Hunter Rouse And Shields Diagram., pages 1096–1098. World Scientific, Singapore, 2002
- 40. Kor J, Li Z, Hu H, Chen X, Wang Q, Yang W. Numerical understanding of Campbell's casting design rules. TMS Annu Meet. 2006;2006:177-186.
- 41. Li S-, Xiong S-. Research progress on modelling and simulation of air and oxide film entrapment during mold filling of aluminium casting. Zhuzao. 2008;57(4):321-325.

- 42. Liao K-, Wong C-, Hsieh P-, Lai Y-. Applications of Campbell's casting rules on high quality aluminium castings. TMS Annu Meet. 2005:385-394.
- 43. M. C. Flemings. Solidification processing. McGraw-Hill series in materials science and engineering. McGraw-Hill, 1974
- 44. M. Carter and A. Starobin. Modeling volume changes and high temperature microstructure in cast iron. Technical Note: TN-89 on http://www.flow3d.com, April 2011. Flow Science, ed.
- 45. M. R. Barkhudarov and C. W. Hirt. Tracking defects. First International Aluminum Casting Technology Symposium, 1998
- 46. M. R. Barkhudarov and S. B. Chin. Stability of a numerical algorithm for gas bubble modelling. International Journal for Numerical Methods in Fluids, 19(5):415–437, 1994.
- 47. M. R. Barkhudarov. Enhancements to heat transfer and solidification shrinkage models in FLOW-3D. Technical Note: TN-43 on http://www.flow3d.com, July 1995. Flow Science, ed.
- 48. M., Cohen, and M. C. Flemings. Rapidly Solidified Crystalline Alloys., pages 3. TMS, Warrendale, PA, 1985
- 49. Manual Flow3D https://epdf.tips/flow-3d-v93-user-manual-volume-1.html
- 50. Mikelonis PJ, American Society for Metals, American Foundrymen's Society. Foundry technology, source book: A collection of outstanding articles from the technical literature. Metals Park, Ohio; Des Plaines, Ill.: American Society for Metals; American Foundrymen's Society; 1982:440.
- 51. Miller DN, Lu L, Dahle AK. The role of oxides in the formation of primary iron intermetallic in an al-11.6Si-0.37Mg alloy. TMS Annu Meet. 2005:165-174.
- 52. Ohno, The formation of cast structure, Springer 1987
- 53. Olson E, Hogg S, Onari M, Marscher W. Interference diagrams when Campbell diagrams are not enough. Sound Vib. 2006;40(5):8-10.
- 54. P. Beeley, "Foundry Technology; Elsevier 2001
- 55. P. A. Durbin. On the k-3 stagnation point anomaly. International Journal of Heat and Fluid Flow, 17:89–90, 1996
- 56. R. Kuehl, "Diseño de experimentos 2<sup>a</sup> ed", Thomson 2001
- R. D. Pehlke, A. Jeyarajan, and H. Wada. Summary of Thermal Properties for Casting Alloys and Mold Materials. University of Michigan, December 1982. NSF/MEA-82028, NTIS.
- 58. R. F. Probstein. Physicochemical Hydrodynamics: An Introduction. Wiley-Interscience publication. John Wiley and Sons, 1994.
- 59. R. G. Dean and R. A. Dalrymple. Water Wave Mechanics for Engineers and Scientists. Advanced Series on Ocean Engineering. World Scientific, 1991
- 60. Reilly C, Green NR, Jolly MR, Gebelin J-. The modelling of oxide film entrainment in casting systems using computational modelling. Appl Math Model. 2013;37(18-19):8451-8466.
- 61. S. B. Pope. Turbulent Flows. Cambridge University Press, 2000
- 62. Sahoo M, Sahu S. Principles of metal casting. Third ed. New York: McGraw-Hill Education; 2014.

- 63. Steel founder's association of America, "Steel casting handbook, Supplement 3, dimension Capabilities" 2003.
- 64. Stefanescu, D. M. (2008). Science and engineering of casting solidification (2nd ed.). Springer.
- 65. Stölzel K, Drossel G. Dictionary of metallurgy and foundry technology. German, English. Elsevier 1987
- 66. T. Theofanous, L. Biasi, H. S. Isbin, and H. Fauske. A theoretical study on bubble growth in constant and time-dependent pressure fields. Chemical Engineering Science, 24(5):885–897, 1969.
- 67. W. J. Stronge. Impact Mechanics. Cambridge University Press, Cambridge, UK, 2000.
- 68. Webster PD. Fundamentals of foundry technology. Redhill, Surrey: Portcullis Press; 1980
- 69. Y. Saad. Iterative Methods for Sparse Linear Systems. The PWS Series in Computer Science. PWS Publishing Company, 1996
- 70. Yixlang J, Xuxlang X, Chengzhou Z. An approach to the application of the book of changes in metal casting. World Foundry Congr , WFC. 2010;3:805-809. 2018.
- 71. Zhang SL, Johnson DR, Krane MJM. Influence of riser design on macro segregation in static castings. Int J Cast Metals Res. 2015;28(1):28-38.
- 72. Zhang, D.a, Zhang, Y.b, Yang, X.a, Chen, Z.a, Jiang, Z.a, "Quality Management and Control of Low Pressure Cast Aluminum Alloy", Volume 301, Issue 1, 15 February 2018, Article number 0120545th Annual International Conference on Material Science and Environmental Engineering, MSEE 2017

# ANEXO I MÉTODO EMPÍRICO

### ANEXO I MÉTODO EMPÍRICO

Los métodos empíricos son conocidos así por ser resultado de años de ensayo y error. Están recogidos de forma metódica, están adaptados para tipos específicos de fundiciones y recogen los avances tecnológicos del momento en esa área.

Estos reflejan la acumulación minuciosa de datos de los diferentes ensayos de producción y contrastados con la defectología aparecida en la pieza acabada. Los defectos son el método indirecto de medición de la calidad del método en fundición, junto con la micro y macrografía. No existía ni existe, otra manera de poder verificar que ocurría dentro del molde por las altas temperaturas que se originan y la inaccesibilidad al mismo.

Los métodos recogidos aquí están relacionados con las diferentes corrientes técnicas que existían en Europa desde el siglo XIX y XX hasta la aparición de la simulación computarizada. Se basan en la introducción paulatina de conceptos ingenieriles como la termodinámica (como gradiente térmico), y la mecánica de fluidos (como las de pérdidas de carga, golpes de ariete, flujos lineales y turbulentos, etc.)

Cada método tiene que ver mucho con los problemas específicos que la industria que ese país tenía en esos momentos y exponen conceptos, a veces erróneos. Suposiciones, que eran después corregidas con graficas experimentales para su uso en la industria.

#### i.MÉTODO FRANCÉS

Es el primer método serio y sistemático de fundición y el primero que se enfoca con conceptos de mecánica de fluidos en el mundo. Introduce el concepto de rendimiento hidráulico en donde engloba los conceptos de pérdidas de carga, parametrizando algunos de sus elementos.

Como todos los grandes avances, tiene su origen en la industria militar francesa del siglo XVIII y XIX. Los descubrimientos en temas de fluidodinámica son rápidamente aplicados a la fundición de metales consiguiendo un salto importante en la calidad de las piezas.

## a) CÁLCULO DE LOS RENDIMIENTOS HIDRÁULICOS DE LOS SISTEMAS DE LLENADO EN MOLDEO CON ARENA.

Para dominar el tiempo de llenado en moldeo con arena, es necesario tener en cuenta las pérdidas de carga regulares y singulares encontradas a lo largo del sistema de llenado. Para hacer esto, se censaron estas pérdidas para el conjunto de las partes del molde (estanque/fuente/barreño, bajada, pie de colada, canales, ataques, etc.) con el fin de definir una ecuación analítica de rendimiento hidráulico. Este cálculo adaptado al conjunto de los escalonamientos de un sistema de llenado fue validado por numerosos ensayos experimentales.

Para colar piezas de fundición en molde de arena, los fundidores disponían de los sistemas de llenado en la periferia de las piezas. Su función es llenar las piezas en las condiciones óptimas tanto desde el punto de vista hidráulico, térmico como temporal.

El objetivo era definir las condiciones ideales para llenar toda la pieza de fundición en un tiempo dado. Esto implica tener en cuenta, al calcular el sistema de llenado, las pérdidas de carga encontradas por el metal a lo largo del sistema.

Se ha listado el conjunto de las pérdidas de carga regulares y singulares creadas a lo largo de los sistemas y medido experimentalmente los rendimientos hidráulicos. Estos datos han permitieron definir una relación que ayudaba a evaluar el rendimiento hidráulico de los sistemas de llenado.

#### • Definición del rendimiento hidráulico.

El rendimiento hidráulico de un sistema, anotado como Rh, caracteriza al conjunto de las pérdidas de carga a lo largo de los conductos. Define la relación entre el caudal de derrame real sobre el caudal de derrame perfecto.

$$Rh = \frac{CaudalReal}{CaudalPerfecto}$$

Ecuación 0.0

Corresponde igualmente a la relación de la velocidad máxima real sobre la velocidad máxima posible (sin pérdida de carga).

Rh= 
$$\frac{V_{\text{max real}}}{V_{\text{max sin perdidadecarga}}} = \frac{V_{\text{max}}}{\sqrt{2gh}}$$

Ecuación 0.1

#### • Ecuación Analítica del Rendimiento Hidráulico

A partir de la ecuación de Bernoulli,

$$H + \frac{V^2}{2g} + \frac{P}{\delta * g} = Cte$$
  
Ecuación 0.2

Se puede escribir la igualdad entre dos puntos de un sistema de llenado:

$$H_1 + \frac{V_1^2}{2g} + \frac{P_1}{\delta * g} = H_2 + \frac{V_2^2}{2g} + \frac{P_2}{\delta * g}$$

Ecuación 0.3

Siendo  $\Delta H_{1-2}$  las pérdidas de carga generadas a lo largo del sistema entre los puntos 1 y 2. Si se escribe esta igualdad entre dos puntos (o y f) donde se ejerce la presión atmosférica Pa, se obtiene la siguiente igualdad:

 $H + \frac{P_a}{\rho g} = \frac{V_f^2}{2g} + \frac{P_a}{\rho g} + \sum_{i=0}^f \xi_i \frac{V_i^2}{2g}$ 



Figura 0.1 Alimentación típica de fundición

- $\xi_i \frac{v_i^2}{2g}$  corresponde a la pérdida de carga en el punto i.
- En el punto 0: nivel superior del barreño o cangilón de colado  $H_0 = h, V_0 = 0$ ,  $P_0 = P_a$
- En el punto f: primer lugar del canal donde los desprendimientos intermitentes aparecen hasta el extremo final del sistema (anotado como n).
  H<sub>f</sub> = 0, P<sub>f</sub> = P<sub>a</sub>

permiten escribir el rendimiento hidráulico del sistema de llenado:

$$R_{h} = \frac{1}{\sqrt{\frac{S_{min}^{2}}{S_{f}^{2}} + \sum_{i=0}^{f} \xi_{i} \frac{S_{min}^{2}}{S_{i}^{2}}}}$$

Ecuación 0.5

#### b) DETERMINACIÓN DE LAS PÉRDIDAS DE CARGA

Las pérdidas de carga se creían resultaban de un proceso de transformación irreversible de la energía mecánica en calor originado por la viscosidad molecular y
turbulenta del fluido en movimiento. Se distinguían dos tipos de pérdidas de carga: las pérdidas de carga regulares (por fricción) y las pérdidas de carga singulares que resultan de turbulencias en lugares particulares del sistema de llenado.

## 1. PÉRDIDAS DE CARGA REGULARES

Las pérdidas de carga regulares son provocadas por la viscosidad del fluido en movimiento. Resultan de un intercambio de cantidad de movimiento entre las partículas o entre las diferentes capas del fluido que se desplazan con velocidades diferentes. Los coeficientes de pérdidas de carga eran proporcionales a la longitud recorrida y se expresan como:

$$\xi_r = \frac{\lambda}{D_h} xL = kxL$$

Ecuación 0.6

- $\lambda$  = coeficiente de pérdidas de carga por fricción, por unidad de longitud y relativa al diámetro hidráulico (sin unidad), función del número de Reynolds y de la rugosidad media  $R_a/D_h$  (curvas de Nikuradse).
- $D_h = \text{diámetro hidráulico del canal (m)}$
- L = longitud del conducto (m)
- K = coeficiente de pérdidas de carga por fricción y por unidad de longitud  $(m^{-1})$

El número de Reynolds  $(R_e)$ , es un coeficiente sin dimensión definido por

$$R_e = \frac{V x D_h}{\gamma}$$

Ecuación 0.7

Donde:

- *V*= velocidad media de derrame,
- $\gamma = \frac{\pi}{\rho}$  la viscosidad cinemática del fluido ( $\mu$ = viscosidad dinámica y  $\rho$  = densidad)
- $D_h = \frac{4S}{P}$ el diámetro hidráulico del conducto (S = sección del conducto, P = perímetro del conducto). El diámetro hidráulico define una magnitud dimensional homogénea en el conjunto de los perfiles de los conductos.

Entre las numerosas aproximaciones que permitían definir los coeficientes de pérdidas de carga por fricción, por unidad de longitud y relativo al diámetro hidráulico, se elige ésta utilizada para calcular los decrecimientos de los canales horizontales.

Para 5 x 103 
$$\le R_e \le 108$$
 y 10-6  $\le R_a/D_h \le 10-2$  : $\lambda_{Ra=0} = \frac{1}{(1.8 \times ln_e - 1.64)^2}$   
Ecuación 0.8

Para 5 x 103 
$$\le R_e \le 108$$
 y 10-6  $\le R_a/D_h \le 10-2$  : $\lambda = \frac{1.45}{\left[Ln\left(\frac{Ra}{3.7D_h} + \frac{5.74}{Re^{0.9}}\right)\right]^2}$ 

Ecuación 0.9

Ra corresponde a la rugosidad media del molde. A partir de mediciones efectuadas en laboratorio, resultaba que la rugosidad de un molde realizado en arena de finura AFS 55 (el tamaño medio de los granos es de 250  $\mu$ m) es de 25  $\mu$ m, y la de un molde realizado en arena de finura 110 (el tamaño medio de los granos es de 140  $\mu$ m) es de 11  $\mu$ m. A la vista de las curvas de la figura 0.2, constatamos que la rugosidad media no tiene más que una débil influencia sobre las pérdidas de carga regulares.



Figura 0.2 Coeficiente de perdidas por fricción por unidad de longitud y relativa al diámetro hidráulico

# 2. PÉRDIDAS DE CARGA SINGULARES

Las pérdidas de carga singulares resultaban de perturbaciones encontradas por el metal en movimiento. Se caracterizan por arrastres (desprendimientos) de pared y por la formación de torbellinos en los lugares donde hay cambio de sección y de dirección (entrada en el sistema, ensanchamiento, estrechamientos, curvatura, filtración,). Provenían igualmente de las pérdidas de presión dinámica aguas abajo del sistema cuando el metal alcanza el molde.

# • Entrada en una bajada

Todo estrechamiento de sección entre la reserva de metal (barreño ó cangilón) y la bajada acarrea pérdida de carga que son función de la relación de las secciones, del perfil de la reserva de metal, y del radio de unión entre la bajada y el barreño o el cangilón. Para

un radio de unión superior a la quinta parte del diámetro de la bajada (elegir preferentemente un radio de enlace igual al diámetro de la bajada) los coeficientes de pérdidas de carga son:

> Barreño = 0.03 en el caso de un barreño Cangilón = 0.20 en el caso de un cangilón

# • Cambio de dirección

Todo cambio de dirección sin radio de curvatura frena el derrame provocando pérdidas de carga generalmente inútiles (creación de torbellinos o de corrientes de recirculación) e inicia del lado interior del recodo, de los arrastres (desprendimientos) de las venas fluidas. Estos desprendimientos se deben evitar sistemáticamente porque son el origen de la erosión de la arena sobre las partidas puestas en depresión y en los defectos de suciedad.

- Pie de colada

Los coeficientes de pérdida de carga generados por un pie de colada de sección cuadrada ó circular y de diámetro hidráulico de entrada  $D_h$  (radio interno) son definidos por:

 $\xi_{pie\ de\ colada} = 26\lambda R_h$ 



Figura 0.3 Pie de colada recto

Los coeficientes de pérdidas de carga generados por un pie de colada concéntrico de sección cuadrada o circular y de diámetro hidráulico de entrada $D_H$  (radio interno  $D_H$  y radio externo  $2D_H$ ) son definidas por

$$\xi_{codo} = 14 \sqrt{\frac{c}{R}} * \lambda_{Ra=0}$$

Ecuación 0.11

Ecuación 0.10



Figura 0.4 Pie de colada curvo

-Curvatura de un canal

Los coeficientes de pérdidas de carga encontrados a lo largo de un codo de lado C y de radio R (preferente tomar R=4C) son definidos por:

$$\xi_{codo} = 14 \sqrt{\frac{C}{R}} * \lambda_{Ra=0}$$

Ecuación 0.12



Figura 0.5 Canal curvo

# c) INCLUSIÓN EN LA ECUACIÓN DE RENDIMIENTO HIDRÁULICO

Se ha mostrado que el rendimiento hidráulico de un sistema de llenado es la Ecuación 0.5. Con los coeficientes de perdida de carga se define analíticamente los rendimientos hidráulicos en función de la progresión de las secciones (convergente o divergente).

Los coeficientes de pérdidas de carga  $\xi_i$  propias de los sistemas de llenado son los siguientes:

- $\xi_{barreno} = 0.03$
- $\xi_{cangilon} = 0.2$
- $\xi_{pie\_de\_colada} = 26\mu\lambda_{Ra=0} \approx (0.5*\eta) \ o \ (0.9*\eta)$

 $\eta$  correspondiente a la divergencia del pie de colada. Para un pie divergente tomar igual a 1

•  $\xi_{divergente} = 4 * \left( tag \frac{\alpha}{2} \right)^{1.25} \left( 1 - \frac{S_i}{S_f} \right)^2 + \frac{\lambda}{8 sen_2^{\alpha}} \left( 1 - \frac{S_i^2}{S_f^2} \right)$ 

Ecuación 0.13

•  $\xi_{curva} = 14\lambda_{Ra=0}\sqrt{\frac{c}{R}} = 0.35\sqrt{\frac{c}{R}}$ 

Ecuación 0.14

• 
$$\xi_{ataques} = 1.7$$
  
•  $\xi_{decrecimient\_local} = 0.14 \left(1 - \frac{S_f}{S_i}\right) + \frac{\lambda}{8 se \frac{\alpha}{2}} \left(1 - \frac{S_f^2}{S_i^2}\right)$ 

Ecuación 0.15

• 
$$\xi_{regulares} = \frac{\lambda_i L_i}{Dh_i}$$
 para cada trozo

Ecuación 0.16

# d) CONTRASTE CON LOS RESULTADOS EXPERIMENTALES.

La experiencia con estas suposiciones da un error de +/- 7% con respecto a estos resultados teóricos.

La Figura 0.6 y la Figura 0.7 definen los diferentes sistemas de llenado estudiados. El rendimiento hidráulico de un sistema de llenado corresponde a relación entre el caudal del derrame real sobre el caudal del derrame perfecto.



Figura 0.6 Esquema de sistemas de llenado

Système	Sd Sd	SC Sd	SA Sd	Hauteur de chute Hi et Hf (mm)	Côté initial du canal (mm)	Nombre de niveau d'attaque(s)	Nombre d'attaque(s) par niveau	Lo (mm)	L (mm)
1	1	0.9	1.4	100	15	2	1	150	250
2	1	0.9	1.4	200	15	2	1	150	250
3	1	0.9	1.4	200	25	2	1	250	300
4	1	0.9	1.4	300	15	2	<b>1</b>	150	250
5	1	0,9	1,4	300	25	2	1	250	300
6	1	1	1	100	15	1	1	150	- a
7	1	1	1	100	15	2	1	150	250
8	1	1	1	100	15	1	2	150	
9	1	1	1	100	25	1	1	250	- SE
10	1	1	1	100	25	2	1	250	300
11	1	1,4	1,4	200	15	1	1	150	
12	1	1,4	1,4	200	15	2	1	150	250
13	1	1,4	1,4	200	15	1	2	150	1
14	1	1,4	1.4	200	25	1	1	250	121
15	1	1,4	1,4	200	25	2	1	250	300
16	1	1,7	1,7	300	15	1	1	150	
17	1	1,7	1,7	300	15	2	1	150	250
18	1	1,7	1,7	300	15	1	2	150	
19	1	1,7	1,7	300	25	1	1	250	1.1.1.2
20	1	1,7	1,7	300	25	2	1	250	300

Figura 0.7 Tabla de longitudes de ataque

El caudal real corresponde a la relación del volumen de metal colado sobre el tiempo de llenado:

$$Caudal\_real = rac{Masa\_de\_metal}{tiempo\_de\_derrame * desidad}$$

Ecuación 0.17

mientras que el caudal perfecto corresponde al producto de la velocidad máxima encontrada en el sistema (sin tener en cuenta las pérdidas de carga) por su sección de derrame.

$$Caudal\_perfecto = \sqrt{2gh} * S_a$$
  
Ecuación 0.18

Con lo que el cálculo experimental del rendimiento hidráulico se convierte en:

$$R_{h} = \frac{masa\_de\_metal}{\sqrt{2gh} * S_{a} * tiempo\_de\_derram * densidad}$$
  
Ecuación 0.19

Las Figura 0.8 presentan los ejemplos de sistemas de llenado de altura metalostática 200mm y de diámetro de la bajada comprendida entre 7. Que se pueden utilizar para corregir los cálculos teóricos.



Figura 0.8 Tabla de rendimiento hidráulico para H de 200 mm y unos diámetros

## ii.MÉTODO ALEMÁN

Es el método empírico más moderno y preciso previo a la simulación numérica. Se basa en la recopilación de datos de las grandes empresas de fundición a través de los comités técnicos alemanes recopilados en el trabajo de R. Wlodawer en su libro solidificación en aceros fundidos (Wlodawer, 1966). En su trabajo se recogen las tablas de enfriamiento y pérdidas de carga en función de los tipos de alimentación, modularizando diámetros de canales, posiciones de molde en función de la geometría del molde, temperaturas de colada relacionadas con la viscosidad, .... todo alrededor del tiempo de enfriamiento, que era la variable critica en fundición. Este método combina lo aprendido del método francés en velocidades de llenado con lo aprendido de los procesos de solidificación y transmisión de calor.

Es un trabajo muy profundo y preciso que arranca de la teoría de Chvorinov sobre el módulo de solidificación (Chvorinov, 1954).

Define por primera vez el módulo de solidificación como un volumen de metal fundido entre superficies que lo rodean, por donde evacua el calor y con el tiempo que tarda en hacerlo. Este es un método muy útil para evitar los defectos que aparecen en las piezas por gradiente térmico. Recordemos que la disminución de espesores de material permite aligerar la pieza y reducir costes de fabricación.

Se realizaron infinidad de graficas en función de geometrías y posiciones en la pieza, que se fueron corrigiendo con la experimentación. Durante los últimos años del XIX y y primera mitad del XX la industria alemana de fundición debía dar servicio a una tecnificada industria manufacturera y militar con altos requisitos de calidad y bajo peso que les empujo a este tipo de experimentación.

#### a) EL MÓDULO DE SOLIDIFICACIÓN

El módulo de solidificación es menor, al mismo volumen, cuando menos superficie de enfriamiento tiene (Se solidifica antes). Se introduce el concepto de dividir el volumen en partes, donde la iteración en grandes dados les va llevando a conocer donde se solidifica más tarde.

$$M = \frac{cm^3}{cm^2}$$

Ecuación 0.20

Piezas con igual modulo, solidifican en el mismo tiempo. En estos cálculos se asume que la perdida de calor es igual por todas las caras, independientemente del tipo de arena usado, machos o enfriadores. Como esto no es cierto, se debían hacer las correcciones en los gráficos.

Para un brazo rectangular de a x b de sección, su módulo será



Figura 0.9 Ejemplo de cálculo de módulo de un paralepípedo

Dado que no existían métodos electrónicos para el cálculo, se hicieron una serie de familias de gráficos en función de la geometría principal de la pieza. Así tenemos gráficas para brazos largos, ruedas dentadas, cilindros, casquillos, etc. El arte del diseñador fundidor está en conseguir que todos los elementos de la pieza tengan el mismo modulo o que sean mayores de los que tienen zonas de alimentación de metal liquido anexas para poder circular metal líquido y rellenar los huecos.

Ecuación 0.21

# b) CALCULO PRÁCTICO DEL MÓDULO DE SOLIDIFICACIÓN

Cualquier pieza puede dividirse en elementos básicos como cubos, cilindros, etc. Conociendo los módulos de estos individualmente se puede obtener el del conjunto, sumando o restando volúmenes.



Figura 0.10 Ejemplo de descomposición de una pieza para calcular su módulo

Cada elemento de la figura se puede dividir en las subfiguras que aparecen debajo. Cada una de ellas tiene un módulo que se calcula de la siguiente manera.

elemento	Volumen	Área	Modulo
7	$V = 7,3 \times 10 \times 5$	$A = 2 \times 7,3 \times 10 + 2 \times 5 \times 10$	365
	= 365	$+7,3 \times 5 = 282$	$M = \frac{1}{282} = 1,29$
6	$V = 7,3 \times 10 \times 5,5$	$A = 2 \times 7,3 \times 10 + 2 \times 5,5 \times 10$	401
	= 401	$+7,3 \times 5 = 260$	$M = \frac{1}{260} = 1,54$
5	$V = 7,3 \times 10 \times 6$	$A = 2 \times 7,3 \times 10 + 2 \times 6 \times 10$	438
	= 438	$+7,3 \times 5 = 270$	$M = \frac{1}{270} = 1.57$
4	$V = 7,3 \times 10 \times 6,5$	$A = 2 \times 7,3 \times 10 + 2 \times 6,5 \times 10$	475
	= 475	$+7,3 \times 5 = 280$	$M = \frac{1}{280} = 1,7$
3	$V = 7,3 \times 10 \times 7$	$A = 2 \times 7,3 \times 10 + 2 \times 7 \times 10$	410 _ 1 75
	= 475	$+7,3 \times 5 = 233$	$M = \frac{1}{233} = 1,75$
2 y 1	$V = 13^2 \times 20 \times \frac{\pi}{2}$	$A = 13^2 \times \frac{\pi}{2} \times 2 + 13^2 \times \pi \times 2$	2650
		$\frac{11}{4}$	$M = \frac{1}{881} = 3$
	= 2650	$-4 \times superficie B$	
		= 833	

Figura 0.11 Cálculo de módulos

Como la superficie de contacto tiene diferentes transmisividades de calor se restan las áreas que no están en contacto con el molde, como el caso del elemento 2 y 1. Además debemos de darle unos factores de corrección experimentales para obtener el Módulo real. Como vemos, esto nos da una idea de que partes se enfrían primero y por lo tanto cuales hemos de llenar primero al 100%.

Dado que restar y sumar áreas con los factores de corrección no era tarea fácil, se diseñaron unas tablas prácticas que acercaban con bastante precisión el módulo de trabajo



Figura 0.12 Ejemplo para paralelepípedos

# c) GRADIENTE TÉRMICO Y DIFERENCIA DE MÓDULOS

Es muy importante que las secciones vecinas tengan liquido remanente para poder llenar las zonas que solidifican y que contraen primero. Las zonas con mayor tiempo de solidificación tienen mayores módulos.



Figura 0.13 Crecimiento de un cristal de Fe-C en el proceso de solidificación

El crecimiento de las dendritas de acero sigue el gradiente térmico del líquido. Esto hace que tengamos zonas que puedan estrangularse y producirse huecos en el sólido (defectos)



Figura 0.14 Dirección de solidificación de un canal de alimentación

Por eso las zonas de llenado han de ser las ultimas que se enfríen, o sea las de mayor tiempo de solidificación. El diseñador ha de calcular las direcciones de llenado y las secciones (módulos) para que esta regla se cumpla siempre y evitar efectos indeseados.

$$M_1 = 1,1 M_0$$
  
 $M_2 = 1.1 M_1$   
 $M_3 = 1,2 M_2$ 

Cada factor de relación de módulos dependía de la pericia del diseñador.

Par dirigir esta solidificación se usan elementos auxiliares para mantener el calor (creces, mazarotas, ...) o para enfriar más rápidamente (enfriadores, ...).



Figura 0.15 Enfriadores laterales en molde. Enfriamiento según croquis de fabricante

En función de su tamaño y composición su efecto es más o menos importante, hace que los módulos cambien y las tablas que se usan sean corregidos por unos factores que daba cada fabricante de estos elementos.



Figura 0.16 Tiempos de solidificación en función de los elementos exotérmicos utilizados en combinación con el módulo

El método desarrolla tablas de corrección para infinidad de situaciones y piezas que hace muy versátil el método para los técnicos de fundición y con unos resultados que supusieron un salto en la calidad de la fundición nunca vista hasta la época.

## iii.PERFECCIONAMIENTO MÉTODOS ANTERIORES – TEORÍA DE BIFILM

De la experiencia práctica en producción de Aluminio y los estudios teóricos posteriores en la universidad de Birmingham, John Campbell (Campbell, 2013) desarrolla una nueva teoría sobre el comportamiento de los metales en estado líquido poco difundida hasta el momento académicamente.

Los metales en estado líquido son muy reactivos. Reaccionan con los gases y solidos de su alrededor hasta llegar a un equilibrio químico, debido a las altas temperaturas. Generalmente estas reacciones en equilibrio dan materiales solidos a esas temperaturas que sirven a su vez de barrera para continuar con estas reacciones, generalmente de oxidación.

Los gases pueden disolverse en el metal en una proporción media del 5% y los materiales solidos (mayoritariamente óxidos) en 1% aproximadamente, todo depende del metal y su aleación. Esta propiedad provoca que aparezcan defectos no deseados en la fundición.

#### a) MOVIMIENTO DEL METAL LIQUIDO

En el proceso de llenado de fundición, el metal liquido recorre canales y llega a la pieza. Esta capa superficial de fino oxido, que se produce por reacciones químicas, es rota e introducida en el flujo constantemente, a la vez que se crea otra nueva en el nuevo frente de ola.

Estos trozos de capa pueden disolverse o pueden perdurar como icebergs en el interior del metal líquido.



Figura 0.17 Formación de salpicadura (Campbell, 2013)

Este fenómeno también se produce en regímenes cuasi-estáticos cuando la superficie se enfría. Al enfriarse el metal liquido se contrae, provocando que un chorro de metal liquido salga por la grieta cubriéndola y atrapando la capa inicial. Este proceso puede producir capas de no soldadura de gran tamaño en llenados muy lentos al igual que la lava volcánica (Figura 0.18).



Figura 0.18 Típica unión fría en fundición

Esta capa de óxido puede ser imperceptible, espacialmente en el régimen muy turbulento, pero puede sobrevivir en el metal sirviendo de base para la nucleación del metal o de otros defectos. La velocidad de formación de esta capa tiene rangos de entre 10 a 100 m/s y espesores que pueden llegar hasta 1 mm.



Figura 0.19 Microfotografia de zona Bifilm (Campbell, 2013)

# b) FORMAS EN LAS QUE PUEDE APARECER

Dependiendo del origen del proceso se pueden producir 3 formas de Bifilm:

• Burbujas. Cuando el plegado del frente del fluido es importante, se puede generar bolsas de aire encerradas en estos óxidos, que debido a su baja densidad buscan rápidamente la superficie. Debido a esto tienen forma de globo. Las que primero se forman pueden darles tiempo a alcanzar la superficie, pero las ultimas se pueden quedar atrapadas en las piezas en forma de lágrimas.



Figura 0.20 Macrografía de un Bifilm, confundido históricamente con poros de fundición. (Campbell, 2013)

• Grietas. Cuando las ondas (olas) sobre la superficie son importantes o las contracciones superficiales son grandes, se pueden producir plegamientos de gran longitud que haga que el Bifilm parezca una grieta de unión fría. El mecanismo es como el de una erupción volcánica donde se cubre las capas anteriores de la erupción. (Figura 0.18 y Figura 0.21)



Figura 0.21 Llenado lento de molde. Se superponen capas (Campbell, 2013)

• Inclusiones. Es un caso particular del anterior. Cuando esto ocurre y atrapa otros materiales que flotan en la superficie, se produce una especie de bolsa con materiales diversos.



Figura 0.22 El plegamiento a atrapado otros materiales (Campbell, 2013)

# c) MECANISMOS DE FORMACIÓN

En el flujo turbulento en la superficie, cuando la velocidad del fluido y la rugosidad de las paredes es alta, se provoca que el movimiento del metal liquido sea un régimen turbulento alto. Esto crea olas y chorros de metal fundido que crean y rompen capas de oxidación provocando mucho Bifilm.



Figura 0.23 Generación de ola (Campbell, 2013)



Figura 0.24 Llenados de molde observados con técnicas radiográficas en Aluminio. (Campbell, 2013)

La mayoría de los metales líquidos tienen su  $u_{critica}$  en 0,5  $m/_S$ 

	Danaidad	Tensión		Valasidad
	Densidad	superficial	Altura critica	velocidad
Metal	$Kg m^3$	$Nm^{-1}$	mm	critica $m s^{-1}$
Ti	4110	1,65	12,8	0,5
Al	2385	0,914	12,5	0,5

Mg	1590	0,559	16	0,42
Fe	7015	1,872	10,4	0,79
Ni	7905	1,778	9,6	0,43
Cu	8000	1,285	8,1	0,4
Zn	6575	0,782	7	0,37
Pt	19000	1,8	6,2	0,35
Au	17360	1,14	5,2	0,32
Pb	10678	0,468	4,2	0,29
Hg	13691	0,498	3,9	0,27

Figura 0.25 Velocidades críticas de metales líquidos (Campbell, 2013)

Que concuerda con nuestras experiencias en el campo real de la fundición y nos avala la vieja práctica de no superar el  $1 \frac{m}{s}$ .

Como resumen, los defectos que podemos encontrar dentro de esta familia, y que se confunden con otros de origen totalmente diferentes, son los de la Figura 0.26



Figura 0.26 Familia de defectos Bifilm (Campbell, 2013)

# ANEXO II METODOS COMPUTACIONALES

# ANEXO II METODOS COMPUTACIONALES

Como ya hemos explicado en el capítulo 1, los más avanzados fabricantes de software se están concentrando en la industria, dando así paso a unas pocas soluciones de software que puedan abordar en estos momentos los complejos procesos de fundición.

La diferencia entre ellos es muy sutil y está encerrada en la forma en como abordan la simplificación de cálculos para conseguir resultados aproximados en la menor cantidad de tiempo, acumulando el menor error posible. Esto depende de la industria y sector en el que se utilice.

Después de muchas pruebas y contrastar resultados con piezas reales, podemos decir que todos ellos son muy buenos y las aproximaciones que dan son muy parecidas a la realidad a velocidades menores de 1 m/s.

Sin embargo, hemos podido observar que las simplificaciones e hipótesis que se toman en Flow-3D para fundición, dan resultados más precisos que con otros fabricantes. Es en este nivel de detalle, que puede no tener importancia en el proceso productivo general, pero que en nuestro estudio es de suma importancia, es por el cual, hemos realizado toda la experimentación y simulaciones apoyándonos en este software.

Ahora entraremos a estudiar en detalle que ecuaciones utiliza y que suposiciones asume en el cálculo del llenado de piezas de fundición.

#### i.MÉTODO DEL AIR-GAB-BRIEF USADO POR EL SOFWARE CFD FLOW 3D

FLOW-3D es un software de dinámica de fluidos computacional (CFD) de uso general. Emplea técnicas numéricas especialmente desarrolladas para resolver las ecuaciones de movimiento de los fluidos para obtener soluciones transitorias y tridimensionales a problemas de flujo de múltiples escalas y múltiples formas físicas. Un conjunto de opciones físicas y numéricas permite a los usuarios aplicarlo a una amplia variedad de fenómenos de flujo de fluidos y transferencia de calor.

El movimiento del fluido se describe con ecuaciones diferenciales de segundo orden no lineales, transitorias. Las ecuaciones de movimiento de fluidos deben emplearse para resolver estas ecuaciones.

El modelo numérico comienza con una malla computacional o cuadrícula. Se compone de una serie de elementos interconectados, o celdas. Estas celdas subdividen el espacio físico en pequeños volúmenes con varios nodos asociados con cada volumen. Los nodos se utilizan para almacenar valores de las incógnitas, como la presión, la temperatura y la velocidad. La malla es efectivamente el espacio numérico que reemplaza al físico original. Proporciona los medios para definir los parámetros de flujo en ubicaciones discretas, establecer condiciones de contorno y, por supuesto, para desarrollar aproximaciones numéricas de las ecuaciones de movimiento del fluido. El enfoque FLOW-3D consiste en subdividir el dominio de flujo en una cuadrícula de celdas rectangulares, a veces llamadas elementos de ladrillo.

Una malla computacional efectivamente discretiza el espacio físico. Cada parámetro de fluido está representado en una malla por una matriz de valores en puntos discretos. Como los parámetros físicos reales varían continuamente en el espacio, una malla con un espaciado fino entre nodos proporciona una mejor representación de la realidad que una más gruesa. Llegamos entonces a una propiedad fundamental de una aproximación numérica: cualquier aproximación numérica válida se acerca a las ecuaciones originales a medida que se reduce el espaciado de la cuadrícula. Si una aproximación no satisface esta condición, debe considerarse incorrecta.

Las rejillas rectangulares son muy fáciles de generar y almacenar debido a su naturaleza regular y estructurada. Un espacio de cuadrícula no uniforme agrega flexibilidad cuando se combinan dominios de flujo complejos. Las celdas computacionales se numeran de manera consecutiva utilizando tres índices, i en la dirección x, j en la dirección y y k en la dirección z. De esta manera, cada celda en una malla tridimensional puede ser identificada por una dirección única (i, j, k), similar a las coordenadas de un punto en el espacio físico.

Las rejillas rectangulares estructuradas conllevan beneficios adicionales a la relativa facilidad del desarrollo de métodos numéricos, la transparencia de estos últimos con respecto a su relación con el problema físico original y, finalmente, la precisión y estabilidad de las soluciones numéricas. Los algoritmos numéricos más antiguos basados en la diferencia finita y los métodos de volumen finito se han desarrollado originalmente en tales mallas. Forman el núcleo del enfoque numérico en FLOW-3D. El método de diferencias finitas se basa en las propiedades de la expansión de Taylor y en la aplicación directa de la definición de derivadas. Es el más antiguo de los métodos aplicados para obtener soluciones numéricas a ecuaciones diferenciales, y se considera que la primera aplicación fue desarrollada por Euler en 1768. El método de volumen finito se deriva directamente de la forma integral de las leyes de conservación para el movimiento de fluidos y por lo tanto, naturalmente posee las propiedades de conservación.

FLOW-3D puede operarse en varios modos correspondientes a diferentes casos limitantes de las ecuaciones generales de fluidos. Por ejemplo, un modo es para flujos compresibles, mientras que otro es para situaciones de flujo puramente incompresibles. En este último caso, la densidad y la energía del fluido pueden suponerse constantes y no es necesario calcularlas. Además, si hay un fluido y dos modos de fluido, la superficie libre se puede incluir en el modo incompresible de un fluido. Estos modos de operaciones corresponden a diferentes opciones para las ecuaciones que rigen el movimiento.f

Es complejo modelar superficies libres en cualquier entorno computacional porque los parámetros de flujo y las propiedades de los materiales, como la densidad, la velocidad y la presión experimentan una discontinuidad. En FLOW-3D, la inercia del gas adyacente al líquido se descuida, y el volumen ocupado por el gas se reemplaza por un espacio vacío, vacío de masa, representado solo por una presión y temperatura uniformes. Este enfoque tiene la ventaja de reducir el esfuerzo computacional, ya que en la mayoría de los casos los detalles del movimiento del gas no son importantes para el movimiento de un líquido mucho más pesado. La superficie libre se convierte en uno de los límites externos del líquido. Una definición adecuada de las condiciones de contorno en la superficie libre es importante para una captura precisa de la dinámica de la superficie libre.

El método de Volumen de Fluido (Volume of Fluid = VOF) se emplea en FLOW-3D para este propósito. Consta de tres componentes principales, la definición del volumen de la función del fluido, un método para resolver la ecuación de transporte VOF y el establecimiento de las condiciones de contorno en la superficie libre.

## ii.ECUACIÓN DE MOVIMIENTO

## a. SISTEMAS DE COORDENADAS

Las ecuaciones diferenciales para resolver están escritas en términos de coordenadas cartesianas (x, y, z). Para las coordenadas cilíndricas  $(r, \theta, z)$ , la coordenada x se interpreta como la dirección radial, la coordenada y se transforma en la coordenada azimutal  $\theta$ , y z es la coordenada axial. Para geometría cilíndrica, se deben agregar términos adicionales a las ecuaciones cartesianas de movimiento. Estos términos se incluyen con un coeficiente  $\xi$ , tal que  $\xi = 1$  corresponde a la geometría cartesiana, mientras que  $\xi = 1$  corresponde a la geometría cilíndrica.

Todas las ecuaciones están formuladas con funciones de porosidad de área y porosidad de volumen. Esta formulación, llamada FAVOR para el Método de Representación de Obstáculos de Área Fraccional / Volumen [Hirt-Sicilian-1985] se usa para modelar regiones geométricas complejas.

Por ejemplo, las regiones de porosidad de volumen cero se usan para definir obstáculos, mientras que las porosidades de área se pueden usar para modelar deflectores porosos delgados. Las funciones de porosidad también introducen algunas simplificaciones en la especificación de las condiciones de borde de superficie libre y de pared.

Generalmente, en FLOW-3D, las fracciones de área y volumen son independientes del tiempo. Sin embargo, estas cantidades pueden variar con el tiempo cuando se emplea el modelo de obstáculo móvil.

#### **b. ECUACIÓN DE CONTINUIDAD Y SUS VARIACIONES**

La ecuación general de continuidad de masa es:

$$V_F \frac{\partial \rho}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x} (\rho u A_x) + R \frac{\partial}{\partial y} (\rho v A_y) + \frac{\partial}{\partial z} (\rho \omega A_z) + \xi \frac{\rho u A_x}{x} = R_{DIF} + R_{SOR}$$
  
Ecuación 1.1

donde:

- $V_F$  es la fracción de volumen abierta al flujo
- $\rho$  es la densidad del fluido
- $R_{DIF}$  es la difusión de la turbulencia
- $R_{SOR}$  es la fuente

Los componentes de velocidad (u, v, w) están en las direcciones de coordenadas (x, y, z) o  $(r, R_{SOR}, z)$ .  $A_x$  es el área fraccionaria abierta para fluir en la dirección x,  $A_y$  y  $A_z$  son fracciones de área similares para el flujo en las direcciones y y z, respectivamente. El coeficiente R depende de la elección del sistema de coordenadas de la siguiente manera. Cuando se utilizan coordenadas cilíndricas, los derivados en y deben convertirse en derivados azimutales,

$$\frac{\partial}{\partial y} \to \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial \theta}$$

Ecuación 1.2

Esta transformación se realiza utilizando la forma equivalente.

 $\frac{1}{r}$ 

$$\frac{\partial}{\partial \theta} = \frac{r_m}{r} \frac{\partial}{\partial y}$$

Ecuación 1.3

donde:

$$y = r_m \theta$$

• *r*<sub>m</sub> es un radio de referencia fijo.

La transformación dada por la Ecuación 1.3 es particularmente interesante porque su implementación solo requiere el multiplicador  $R = \frac{r_m}{r}$  en cada y derivada en las ecuaciones de coordenadas cartesianas originales. Cuando se usan las coordenadas cartesianas, R se establece en la unidad y  $\xi$  se establece en cero.

El primer término en el lado derecho de la Ecuación 1.1, es un término de difusión turbulento,

$$R_{DIF} = \frac{\partial}{\partial x} \left( v_{\rho} A_{x} \frac{\partial \rho}{\partial x} \right) + R \frac{\partial}{\partial y} \left( v_{\rho} A_{y} R \frac{\partial \rho}{\partial y} \right) + \frac{\partial}{\partial z} \left( v_{\rho} A_{z} \frac{\partial \rho}{\partial z} \right) + \xi \frac{\rho v_{\rho} A_{x}}{x}$$
  
Ecuación 1.4

donde:

- $v_p$  es el coeficiente igual a  ${}^{S_c \mu}/\rho$ , en el que  $\mu$  es el coeficiente de difusión de momento (por ejemplo, la viscosidad)
- $S_c$  es una constante cuyo recíproco se conoce generalmente como el número de Schmidt turbulento.

Este tipo de difusión masiva solo tiene sentido para procesos de mezcla turbulentos en fluidos que tienen una densidad no uniforme

El último término  $R_{SOR}$ , en el lado derecho de la Ecuación 1.1 es un término fuente de densidad que se puede usar, por ejemplo, para modelar la inyección de masa a través de superficies porosas.

Los problemas de flujo compresible requieren una solución de la ecuación de transporte de densidad completa como se indica en la Ecuación 1.1. Para fluidos incompresibles,  $\rho$  es una constante y la *Ecuación 1.1* se reduce a la condición de incompresibilidad

$$\frac{\partial}{\partial x}(uA_x) + R\frac{\partial}{\partial y}(vA_y) + \frac{\partial}{\partial z}(wA_z) + \xi \frac{uA_x}{x} = \frac{R_{SOR}}{\rho}$$
  
Ecuación 1.5

Para problemas en los que la propagación de ondas de presión acústica es importante, pero el fluido puede tratarse de otra manera como incompresible, la derivada en el tiempo de la densidad se aproxima a

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} \approx \frac{1}{c^2} \frac{\partial \rho}{\partial t}$$

Ecuación 1.6

donde:

- $c^2$  es la velocidad del sonido al cuadrado
- *p* es la presion

Esta aproximación es válida en el rango

$$\left|\frac{\delta\rho}{\rho}\right| < 0.1$$

Ecuación 1.7

Con esta aproximación, la ecuación de continuidad modificada se convierte en

$$\frac{V_F}{\rho c^2} \frac{\partial \rho}{\partial t} + \frac{\partial u}{\partial x} + R \frac{\partial v A_y}{\partial y} + \frac{\partial w}{\partial z} + \xi \frac{u A_x}{x} = \frac{R_{SOR}}{\rho}$$

Ecuación 1.8

#### c. ECUACIÓN DE MOMENTO

Las ecuaciones de velocidad del fluido (u, v, w) en las tres direcciones de coordenadas son las de Navier-Stokes con algunos términos adicionales.

$$\frac{\partial u}{\partial t} + \frac{1}{V_F} \left( uA_x \frac{\partial u}{\partial x} + vA_y R \frac{\partial u}{\partial y} + wA_z \frac{\partial u}{\partial z} \right) - \xi \frac{A_y v^2}{xV_F} \\ = -\frac{1}{\rho} \frac{\partial p}{\partial x} + G_x + f_x - b_x - \frac{R_{SOR}}{\rho V_F} (u - u_w - \delta u_S)$$

$$\frac{\partial u}{\partial t} + \frac{1}{V_F} \left( uA_x \frac{\partial v}{\partial x} + vA_y R \frac{\partial v}{\partial y} + wA_z \frac{\partial v}{\partial z} \right) + \xi \frac{A_y uv}{xV_F} \\ = -\frac{1}{\rho} \left( R \frac{\partial p}{\partial y} \right) + G_y + f_y - b_y - \frac{R_{SOR}}{\rho V_F} \left( v - v_w - \delta v_S \right)$$

$$\begin{aligned} \frac{\partial w}{\partial t} + \frac{1}{V_F} \left( uA_x \frac{\partial w}{\partial x} + vA_y R \frac{\partial w}{\partial y} + wA_z \frac{\partial w}{\partial z} \right) \\ &= -\frac{1}{\rho} \frac{\partial p}{\partial z} + G_z + f_z - b_z - \frac{R_{SOR}}{\rho V_F} \left( w - w_w - \delta w_S \right) \\ & Ecuación 1.9 \end{aligned}$$

En estas ecuaciones:

- $(G_x, G_y, G_z)$  son las aceleraciones del cuerpo
- $(f_x, f_y, f_z)$  son las aceleraciones viscosas
- $(b_x, b_y, b_z)$  son pérdidas de flujo en medios porosos o a través de placas deflectoras porosas, y los términos finales explican la inyección de masa en una fuente representada por un componente geométrico.

El término  $U_w = (u_w, v_w, w_w)$  en la Ecuación 1.9 es la velocidad del componente fuente, que generalmente no será cero para una fuente de masa en un objeto en movimiento general (GMO).

El término  $U_S = (u_S, v_S, w_S)$  es la velocidad del fluido en la superficie de la fuente en relación con la fuente en sí. Se calcula en cada volumen de control como

$$U_S = \frac{dQ}{\rho_Q dA} n$$

Ecuación 1.10

donde:

- dQ es el caudal másico
- $\rho_0$  es la densidad de la fuente de fluido,
- *dA* es el área de la superficie de origen en la celda
- *n* es la normal a la superficie. Cuando d = 0 en la Ecuación 1.9 la fuente es del tipo de presión de estancamiento. Si d = 1, la fuente es del tipo de presión estática.

En una fuente de presión de estancamiento, se supone que el fluido ingresa al dominio a velocidad cero. Como resultado, debe acumularse presión en la fuente para

alejar el fluido de la fuente. Estas fuentes están diseñadas para modelar el fluido que emerge al final de un cohete o un globo de desinflado. En general, las fuentes de presión de estancamiento se aplican a los casos en que el impulso del líquido emergente se crea dentro del componente fuente, como en un motor de cohete.

En una fuente de presión estática, la velocidad del fluido se calcula a partir del caudal másico y el área de superficie de la fuente. En este caso, no se requiere presión adicional para expulsar el fluido de la fuente. Un ejemplo de tal fuente es el fluido que emerge de un tubo largo y recto.

La distinción entre estos dos tipos de fuentes de masa es importante cuando la fuerza que actúa desde el fluido en el componente fuente debe calcularse con precisión. Este es el caso de los componentes de GMO de movimiento acoplado. Tenga en cuenta que la propiedad de presión estática o de estancamiento no se aplica a la fuente de masa negativa, es decir, los sumideros.

Para una viscosidad dinámica variable  $\mu$ , las aceleraciones viscosas son

$$\rho V_F f_x = wsx - \left\{ \frac{\delta}{\delta x} (A_x \tau_{xx}) + R \frac{\partial}{\partial y} (A_y \tau_{xy}) + \frac{\partial}{\partial z} (A_z \tau_{xz}) + \frac{\xi}{x} (A_z \tau_{xx} - A_y \tau_{yy}) \right\}$$

$$\rho V_F f_y = wsy - \left\{ \frac{\delta}{\delta x} (A_x \tau_{xy}) + R \frac{\partial}{\partial y} (A_y \tau_{yy}) + \frac{\partial}{\partial z} (A_z \tau_{yz}) + \frac{\xi}{x} (A_x - A_y \tau_{xy}) \right\}$$

$$\rho V_F f_z = wsz - \left\{ \frac{\delta}{\delta x} (A_x \tau_{xz}) + R \frac{\partial}{\partial y} (A_y \tau_{yz}) + \frac{\partial}{\partial z} (A_z \tau_{zz}) + \frac{\xi}{x} (A_z \tau_{xz}) \right\}$$

$$Ecuación 1.11$$

Donde

$$\begin{aligned} \tau_{xx} &= -2\mu \left\{ \frac{\partial u}{\partial x} - \frac{1}{3} \left( \frac{\partial u}{\partial x} + R \frac{\partial v}{\partial y} + \frac{\partial w}{z} + \frac{\xi u}{x} \right) \right\} \\ \tau_{yy} &= -2\mu \left\{ R \frac{\partial v}{\partial y} + \xi \frac{u}{x} - \frac{1}{3} \left( \frac{\partial u}{\partial x} + R \frac{\partial v}{\partial y} + \frac{\partial w}{z} + \frac{\xi u}{x} \right) \right\} \\ \tau_{zz} &= -2\mu \left\{ \frac{\partial w}{\partial z} - \frac{1}{3} \left( \frac{\partial u}{\partial x} + R \frac{\partial v}{\partial y} + \frac{\partial w}{z} + \frac{\xi u}{x} \right) \right\} \\ \tau_{xy} &= -\mu \left\{ \frac{\partial v}{\partial x} + R \frac{\partial u}{\partial y} - \frac{\xi v}{x} \right\} \\ \tau_{xz} &= -\mu \left\{ \frac{\partial u}{\partial z} + \frac{\partial w}{\partial x} \right\} \\ \tau_{yz} &= -\mu \left\{ \frac{\partial v}{\partial z} + R \frac{\partial w}{\partial y} \right\} \end{aligned}$$

Ecuación 1.12

#### o Tension cortante en la pared

En las expressiones anteriores, los términos wsx, wsy, y wsz son tensiones cortantes de la pared. Si se omiten estos términos, no hay tensión de corte de la pared porque los términos restantes contienen las áreas de flujo fraccional  $(A_x, A_y, A_z)$  que desaparecen en las paredes. Las tensiones de la pared se modelan asumiendo una velocidad tangencial de cero en la parte de cualquier área cerrada. Los límites de malla y obstáculos en movimiento son una excepción porque pueden asignarse velocidades tangenciales distintas de cero. En este caso, el movimiento límite permitido corresponde a una traslación de cuerpo rígido en el límite paralelo a su superficie.

#### Calculo de la viscosidad

A la viscosidad dinámica  $\mu$ , pueden asignarse valores moleculares constantes para cada fluido en uno o dos componentes de fluidos. En celdas de malla que contienen una mezcla, la viscosidad se evalúa como un promedio ponderado por fracción de volumen de los valores constantes. En el modelo de un solo fluido, el fluido puede constar de dos componentes, cada uno con su propia densidad y viscosidad constantes. En este caso, la viscosidad del fluido de la mezcla se evalúa como un promedio ponderado por fracción de volumen de las dos constantes. Además, la viscosidad del fluido puede ser una función de la fracción sólida para fluidos parcialmente solidificados.

Cuando se usa la opción de turbulencia, la viscosidad es una suma de los valores moleculares y turbulentos. Para fluidos no newtonianos, la viscosidad puede ser una función de la tasa de deformación y / o la temperatura. Se utiliza en FLOW-3D una expresión genérica basada en el modelo "Carreau" para la viscosidad dependiente de la tasa de deformación:

$$\mu = \mu_{\infty} + \frac{\mu_0 E_T - \mu_{\infty}}{\lambda_{00} + [\lambda_0 + (\lambda_1 E_T)^2 2e_{ij}e_{ij}]^{\frac{1-n}{2}}} + \frac{\lambda_2}{\sqrt{2e_{ij}e_{ij}}}$$
*Ecuación 1.13*

donde

$$e_{ij} = \frac{1}{2} \left( \frac{\partial u_i}{\partial x_j} + \frac{\partial u_j}{\partial x_i} \right)$$

Ecuación 1.14

es la tasa de tensión del fluido en la notación del tensor cartesiano  $\mu_{\infty}, \mu_0, \lambda_0, \lambda_1, \lambda_2, y n$  son constantes y

$$E_{T} = exp\left[a\left(\frac{T^{*}}{T-b} - C\right)\right]$$
  
Ecuación 1.15

Y  $T^*$ , *a*, *b* y *c* también son constantes, y *T* es la temperatura del fluido. Expresiones dadas por la Ecuación 1.13 y la Ecuación 1.15 se puede especificar usando variables de entrada de acuerdo con la siguiente tabla de correspondencia:

 $\begin{array}{ll} & \mu_0 = MU1 & a = MUTMP1 & T^* = TSTAR \\ & \lambda_0 = MUC0 & b = MUTMP2 \\ & \lambda_1 = MUC1 & c = MUTMP3 \\ & \lambda_2 = MUC4 \\ & n = MUC2 \\ & \mu_\infty = MUC3 \end{array}$ 

La cantidad  $T^*$  sirve como temperatura de referencia. Tenga en cuenta que  $T^*$  y la constante *b* tienen dimensiones de una temperatura. Se puede definir una viscosidad dependiente de la temperatura incluso cuando no hay dependencia de cizallamiento.

Debido a que la viscosidad se evalúa en una subrutina separada (*mucal*) al usuario le resulta relativamente fácil personalizar otros modelos de viscosidad no newtonianos y dependientes de la temperatura. Si la viscosidad  $\mu$  es cero, no se calculan tensiones viscosas.

#### • Perdidas de flujo por reflexion

Las pérdidas de flujo a través de las placas deflectoras porosas tienen la forma (por ejemplo, en la dirección x),

$$b_x = \frac{1}{L}(KBAF1 \, u + 0.5 \, KBAF2 \, u \, |u|)$$

Ecuación 1.16

donde:

- KBAF1 es una constante de entrada que tiene dimensiones de velocidad,
- KBAF2 es una constante de entrada sin dimensiones,
- L es la longitud sobre la cual se produce la pérdida
- u es la velocidad del fluido microscópico dentro del deflector poroso.

Es importante distinguir este último término de la velocidad en masa, que es menor que u por el factor de 1 / PBAF. La velocidad microscópica es la que se calcula en las ecuaciones de flujo Ecuación 1.1 y Ecuación 1.9, y se muestran en gráficos 2D y 3D.

La longitud L se establece igual a la distancia entre los valores de presión ubicados a ambos lados del deflector. A una velocidad u de flujo constante se garantiza una caída de presión fija  $\Delta p$  a través del deflector independiente del espaciado de la malla.

$$\Delta p = \rho(KBAF1 \, u + 0.5 \, KBA \, F2 \, u \, |u|)$$

Ecuación 1.17

Las pérdidas de dirección en y y en z se definen de manera similar con la velocidad y la longitud en la dirección correspondiente. Si KBAF1 y KBAF2 son cero, no se realizan cálculos de pérdida de flujo.

## Marco de referencia no inercial

Para las aplicaciones de salpicadura de fluidos en contenedores en movimiento, es útil modificar las ecuaciones de movimiento para tener una formulación adaptada a las aceleraciones generales no inerciales. La forma de tales aceleraciones en un elemento fluido en movimiento con velocidad es

$$\mathbf{G} = \mathbf{g} - \left\{ \dot{\mathbf{U}} + \dot{\mathbf{\Omega}} \times (\mathbf{r} - \mathbf{R}) + 2\mathbf{\Omega} \times \mathbf{u} + \mathbf{\Omega} \times [\mathbf{\Omega} \times (\mathbf{r} - \mathbf{R})] \right\}$$
*Ecuación 1.18*

En esta expresión g es una aceleración gravitacional constante y  $\hat{U}$  es la aceleración traslacional del punto R en el sistema de coordenadas de malla con respecto a un marco de referencia inercial [Batchelor-1983].

La inclusión del vector R es útil en aplicaciones en cuerpos rígidos donde a menudo R se elige para ser el centro de masa del cuerpo. Si se hace esta elección y ninguna fuerza externa actúa sobre el sistema, entonces  $\dot{U} = 0$ . A menudo, el origen del sistema de coordenadas de cuerpo fijo (malla) se encuentra en el centro de gravedad, en cuyo caso R = 0. El usuario puede especificar aceleraciones gravitacionales constantes a través del término g o aceleraciones de traducción dependientes del tiempo a través del término  $\dot{U}$ .

Para usar esta última opción, o para aceleraciones más generales, el usuario debe especificar las cantidades  $\dot{U}$ ,  $\Omega$ , y  $\dot{\Omega}$  en la subrutina reservada para este propósito (motion). Además, estas cantidades deben expresarse en términos del sistema de coordenadas de malla (por ejemplo, sistema de cuerpo fijo). Siempre se especifican en coordenadas cartesianas, independientemente de si se usan coordenadas de malla cartesianas o cilíndricas. Para las coordenadas cilíndricas, las aceleraciones se transforman automáticamente en los componentes locales apropiados. Se calcula automáticamente los componentes de las aceleraciones locales experimentadas por el fluido a partir de los nueve componentes de movimiento del marco de referencia a través de la Ecuación 1.18 Este es un cálculo completamente general y no requiere la intervención del usuario.

Para casos especiales, el usuario debe proporcionar una rutina (*motion*) para cada nueva aplicación. La versión estándar de (*motion*) puede manejar un número limitado de situaciones a través de los datos de entrada. Estos incluyen variaciones armónicas de los componentes de aceleración y especificación tabular, incluidos los impulsos

Otro caso especial del marco de referencia no inercial es el manejado por el modelo de dinámica de cuerpo rígido acoplado en FLOW-3D. Este modelo resuelve las ecuaciones dinámicas para el movimiento de un cuerpo rígido en el que está incrustado

el marco de referencia computacional. El uso de este modelo generalmente implica la especificación de las fuerzas de control y ambientales, y los pares experimentados por el cuerpo a través de parámetros de entrada o por modificaciones a las dos subrutinas *rbctrl* y *rbenvr*.

#### d. INTERFACES FLUIDAS Y SUPERFICIES LIBRES

Las configuraciones de fluidos se definen en términos de un volumen de función de fluido (VOF), F(x, y, z, t) [Hirt-Nichols-1981]. Esta función representa el volumen de fluido #1 por unidad de volumen y satisface la ecuación

$$\frac{\partial F}{\partial t} + \frac{1}{V_F} \left[ \frac{\partial}{\partial x} (FA_x u) + R \frac{\partial}{\partial y} (FA_y v) + \frac{\partial}{\partial z} (FA_z w) + \xi \frac{FA_x u}{x} \right] = F_{DIF} + F_{SOR}$$

Ecuación 1.19

donde

$$F_{DIF} = \frac{1}{V_F} \left\{ \frac{\partial}{\partial x} \left( v_F A_x \frac{\partial F}{\partial x} \right) + R \frac{\partial}{\partial x} \left( v_F A_y R \frac{\partial F}{\partial y} \right) + \frac{\partial}{\partial z} \left( v_F A_z \frac{\partial F}{\partial z} \right) + \xi \frac{v_F A_x F}{x} \right\}$$

Ecuación 1.20

El coeficiente de difusión se define como  $\nu F = cF^{\mu}/\rho$  donde cF es una constante cuyo recíproco a veces se conoce como un número de Schmidt turbulento. Este término de difusión solo tiene sentido para la mezcla turbulenta de dos fluidos cuya distribución está definida por la función F.

El término  $F_{SOR}$  corresponde a la fuente de densidad  $R_{SOR}$  en la Ecuación 1.1. Es la tasa de tiempo de cambio de la fracción de volumen del fluido #1 asociada con la fuente de masa para el fluido #1.

La interpretación de F depende del tipo de problema a resolver. Los problemas de descompresión deben involucrar un solo fluido con una superficie libre o dos fluidos y no superficies libres. Para un solo fluido, F representa la fracción de volumen ocupada por el fluido. Por lo tanto, existe un fluido donde F = 1 y las regiones vacías corresponden a ubicaciones donde F = 0. Los "vacíos" son regiones sin masa fluida que tienen asignada una presión uniforme. Físicamente, representan regiones llenas de vapor o gas cuya densidad es insignificante con respecto a la densidad del fluido.

Los problemas de dos fluidos pueden estar compuestos por dos fluidos incompresibles o uno compresible y otro incompresible. F representa la fracción de volumen del componente de fluido incompresible, que se conoce como fluido # 1. La región complementaria con fracción de volumen 1 - F representa el fluido # 2 y puede

tener una densidad constante o su densidad se calcula a partir de la ecuación de estado del fluido compresible.

## e. ECUACIONES DE ENERGÍA DEL FLUIDO

Para problemas de flujo compresible o térmico, la ecuación de energía interna es

$$V_F \frac{\partial}{\partial t} (\rho I) + \frac{\partial}{\partial x} (\rho I u A_x) + R \frac{\partial}{\partial y} (\rho I v A_y) + \frac{\partial}{\partial z} (\rho I w A_z) + \xi \frac{\rho I u A_x}{x}$$
$$= -p \left( \frac{\partial u A_x}{\partial x} + R \frac{\partial v A_y}{\partial y} + \frac{\partial w A_z}{\partial z} + \xi \frac{u A_x}{x} \right) + R I_{DIF} + T_{DIF} + R I_{SOR}$$

## Ecuación 1.21

Donde I es la mezcla interna de la energía macroscópica. Para problemas de dos fluidos quedaría:

$$\rho I = F \rho_1 I_1 + (1 - F) \rho_2 I_2$$
Ecuación 1.22

dónde F está la fracción de volumen del fluido # 1 y los índices indican cantidades relacionadas con el fluido # 1 o el fluido # 2.

#### Calor de transformación

Se asume que la energía es función lineal de la temperatura

$$I = CV1T + (1 - f_S) CLHT1$$

Ecuación 1.23

Donde

- CV1 es el calor específico a volumen constante de fluido # 1
- $f_{S}$  es la fracción de solido
- *CLHT*1 es el calor latente

El calor latente asociado con la fusión o solidificación del fluido # 1 se puede definir de dos maneras. El método más simple consiste en especificar la temperatura de solidus TS1, la temperatura de liquidus, TL1 y la energía específica de la transformación de fase que se produce entre estas dos temperaturas es CLHT1. En este caso, el calor latente se elimina linealmente con la temperatura entre TL1 y TS1.

En muchos materiales reales, sin embargo, la liberación de calor latente no es una función lineal de la temperatura. En este caso, el calor latente se puede definir como una función tabular de la temperatura. Esto se puede hacer en forma de energía específica frente a temperatura o fracción sólida frente a temperatura.

El modelo de Solidificación del Hierro tiene su propio comportamiento predeterminado de liberación de calor latente, aunque también se puede usar la entrada tabular [Carter-Starobin-2011].

Solo el fluido #1 puede sufrir un cambio de fase líquido / sólido o sólido / sólido. Se permiten tanto la solidificación como la fusión. La contracción de solidificación es una opción separada que se puede activar. Se permite tener TS1 = TL1, lo que implica una discontinuidad en la relación energía-temperatura.

#### Modelo de macro-segregacion

El modelo de macro-segregación describe la evolución de la composición de la aleación binaria debido a la transformación de fase, la difusión en fases líquidas y sólidas y la convección en el metal líquido. La ecuación de transporte para la composición de la mezcla líquido-sólido  $C_m$ , es

$$V_{F}\frac{\partial C_{m}}{\partial t} + \left(uA_{x}\frac{\partial C_{1}}{\partial x} + vRA_{y}\frac{\partial C_{1}}{\partial y} + wA_{z}\frac{\partial C_{1}}{\partial z}\right) = \frac{\partial}{\partial x}\left(A_{x}D_{l}\frac{\partial C_{l}}{\partial x}\right) + R\frac{\partial}{\partial y}\left(RA_{y}D_{l}\frac{\partial C_{l}}{\partial y}\right) + \frac{\partial}{\partial z}\left(A_{z}D_{l}\frac{\partial C_{l}}{\partial z}\right) + \frac{\partial}{\partial x}\left(A_{x}D_{S}\frac{\partial C_{S}}{\partial x}\right) + R\frac{\partial}{\partial y}\left(RA_{y}D_{S}\frac{\partial C_{S}}{\partial y}\right) + \frac{\partial}{\partial z}\left(A_{z}D_{S}\frac{\partial C_{S}}{\partial z}\right)$$

$$Ecuación 1.24$$

Donde:

•  $C_1 ext{ y } C_2$  son las composiciones en fase líquida y sólida.

*D<sub>l</sub>* y *D<sub>s</sub>* son los coeficientes de difusión de masa en las fases líquida y sólida.

La composición se puede describir como masa de soluto por unidad de volumen de metal o como porcentaje en peso. En esta ecuación, se supone que la fase sólida está en reposo con respecto al dominio computacional.

La composición de la mezcla  $C_m$  se obtiene promediando las composiciones en fase líquida y sólida sobre el volumen de control. Suponiendo que  $C_1$  y  $C_s$  son constantes dentro del volumen de control,

$$C_m = (1 - f_S)C_l + f_S C_S$$
  
Ecuación 1.25

Con

$$C_S = PCOEF C_l$$

Ecuación 1.26

Donde:

 PCOEF es el coeficiente de partición (Lemings 1974) y es constante, por lo tanto, las líneas liquidus y solidus del diagrama de fase son rectas
$$T_l = TMELT - (TMELT - TL1) \frac{c_m}{CSTAR}$$

Ecuación 1.27

$$T_{S} = TMELT - (TMELT - TS1)\frac{c_{m}}{cSTAR}$$
  
Ecuación 1.28

aquí TS1 y TL1 son las temperaturas de solidus y liquidus en C = CSTAR. Si se conoce la composición y la temperatura en un volumen de control, entonces la fracción sólida se puede calcular utilizando las ecuaciones Ecuación 1.25, Ecuación 1.26, Ecuación 1.27 y Ecuación 1.28.

$$f_{S} = \frac{1}{1 - PCOEF} \frac{T - T_{l}}{T - TMELT}$$
Ecuación 1.29

La reacción eutéctica se incluye en el diagrama de fases. En una reacción eutéctica, la transformación de fase se produce isotérmicamente a la temperatura eutéctica T = TEUT. Entonces, la fracción de masa del eutéctico en la colada solidificada está dada por

$$f_e = 1 - \left(1 - \frac{c_m}{CEUT}\right) \frac{1}{1 - PCOEF}$$
Ecuación 1.30

La variación de la densidad del metal líquido debida a los cambios en la composición se tiene en cuenta al usar una expresión lineal para la densidad de la mezcla líquida

$$\rho_{l} = \rho_{0} [1 - CEXTF1(C_{m} - CSTAR)]$$
Ecuación 1.31

dónde  $\rho_0$  está la densidad del líquido en la composición C = CSTAR y

$$CEXF1 = \frac{\rho_0(\frac{1}{\rho_2} - \frac{1}{\rho_1})}{100}$$

Ecuación 1.32

Si la composición está definida en porcentaje de peso y

$$CEXF1 = \frac{1}{\rho_0} \left( \frac{\rho_1}{\rho_2} - 1 \right)$$
Ecuación 1.33

si la composición se define como masa por unidad de volumen;  $\rho_1$  y  $\rho_2$  son las densidades del solvente y soluto, respectivamente

La densidad del metal líquido también puede incluir un término dependiente de la temperatura, como se describe en Flujo flotante. Finalmente, la densidad de la mezcla

líquido / sólido se calcula como el promedio recto de la densidad del líquido dada por la Ecuación 1.31 y la densidad de fase sólida RHOFS.

$$\rho = (1 - f_S)\rho_l + f_S RHOFS$$
Ecuación 1.34

### o Difusión térmica y fuentes

Se incluyen dos procesos de difusión en la expresión anterior, uno  $(RI_{DF})$  para la difusión turbulenta de I y el otro  $(T_{DIF})$  para la conducción de calor. Estos términos se definen como

$$RI_{DIF} = \frac{\partial}{\partial x} \left( v_I A_x \frac{\partial \rho I}{\partial x} \right) + R \frac{\partial}{\partial y} \left( v_I A_y R \frac{\partial \rho I}{\partial y} \right) + \frac{\partial}{\partial z} \left( v_I A_z \frac{\partial \rho I}{\partial z} \right) + \xi \frac{v_I A_x \rho I}{x}$$
$$T_{DIF} = \frac{\partial}{\partial x} \left( k A_x \frac{\partial T}{\partial x} \right) + R \frac{\partial}{\partial y} \left( k A_y R \frac{\partial T}{\partial y} \right) + \frac{\partial}{\partial z} \left( k A_z \frac{\partial T}{\partial z} \right) + \xi \frac{k A_x T}{x}$$
Ecuación 1.35

El coeficiente  $v_I$  es igual a  $c_I^{\mu}/\rho$ , donde  $c_I$  es un número de Prandtl turbulento. En el término de conducción térmica k, la conductividad térmica puede especificarse directamente o puede especificarse el número de Prandtl  $C_T$ , en cuyo caso la conductividad es  $k = \mu \frac{C_v}{C_T}$ . Para problemas de dos fluidos, las conductividades de cada fluido se ponderan localmente por la fracción de volumen del fluido F.

El último término RI<sub>SOR</sub>, en el lado derecho de la Ecuación 1.21 es un término fuente de energía. Las fuentes pueden asociarse con la fuente de masa con mecanismos de transferencia de calor en los límites sólidos, fuentes de calor distribuidas dentro del fluido o calentamiento viscoso. El término fuente de calentamiento viscoso es

$$2\mu \left[ e_{ij}e_{ij} - \frac{1}{3}(e_{11} + e_{22} + e_{33})^2 \right]$$

Ecuación 1.36

donde:

 $e_{ij}$  son los componentes del tensor de velocidad de deformación  $e_{ij}e_{ij} = \sum_{i=1}^{3} e_{ij}e_{ij}$ 

$$e_{ij}e_{ij} = \sum_{i,j=1}^{3} e_{ij}e_{ij}$$

# f. ECUACIÓN DE TEMPERATURA DEL CUERPO

Si se selecciona la opción de transferencia de calor (IHTC > 0) en la entrada, FLOW-3D puede evaluar las temperaturas dinámicas de las estructuras de calor. Las estructuras de calor pueden ser límites de paredes de malla u obstáculos. La ecuación más general resuelta para temperaturas de estructura dinámica es

$$(1 - V_F)\rho_w C_w \frac{CT_w}{\partial t} - \frac{\partial}{\partial x} \left[ K_w (1 - A_x) \frac{\partial T_w}{\partial x} \right] - R \frac{\partial}{\partial y} \left[ K_w (1 - A_y) R \frac{\partial T_w}{\partial y} \right] - \frac{\partial}{\partial z} \left[ K_w (1 - A_z) \frac{\partial T_w}{\partial z} \right] = T_{SOR}$$

Ecuación 1.37

Donde:

- $T_w$  es la temperatura del cuerpo
- $\rho_w$ ,  $C_w$  y  $K_w$  son los valores de densidad del material sólido, calor específico y conductividad térmica
- $T_{SOR}$ . es un término de energía específico compuesto por contribuciones de fuentes externas específicas y transferencia de calor sólido-líquido.

Algunos obstáculos o límites de paredes pueden tratarse mediante un modelo de temperatura concentrada. En este caso, se supone que toda la estructura está a una temperatura uniforme, lo que elimina el término de conducción y da como resultado

$$M_w C_w \frac{dT_w}{dt} = IT_{sor}$$

Ecuación 1.38

donde ahora  $M_w$  es la masa de la estructura, y el término  $IT_{SOR}$  es la fuente de energía integrada de volumen y / o área.

# g. ECUACIÓN DE ESTADO

Se asume que las ecuaciones de estado compresibles tienen la forma  $\rho = \rho(\rho, T)$ . Un mix de energía única generalmente no es suficiente para determinar estados de fluidos separados para problemas de dos materiales. Por lo tanto, asumimos que los dos materiales tienen la misma temperatura, que divide la energía entre los materiales. Una ecuación de estado de gas perfecta es la predeterminada disponible en FLOW-3D para fluidos compresibles.

Para flujos de flotación térmica, las densidades de fluidos son función de la temperatura solamente. Los fluidos incompresibles generalmente tienen una densidad constante y uniforme. Sin embargo, también se puede definir una densidad no uniforme en un fluido incompresible.

#### iii.MODELOS AUXILIARES

#### a. MODELOS PARA REGIONES DE BURBUJA Y VACÍO

Los cálculos que involucran el flujo de líquidos y gases pueden idealizarse como flujos de "superficie libre". Este tipo de flujo se analiza tratando el gas como una región de presión y temperatura uniformes, lo que nos libera de la determinación de la dinámica del gas. En los cálculos de superficie libre, FLOW-3D identifica la región ocupada por el fluido como regiones donde la función de fracción de fluido no es cero. Los cálculos de superficie libre deben tener dominios en los que la fracción de fluido sea cero. Cada una de esas regiones se denomina "región vacía" (o una "burbuja"). Las regiones vacías pueden estar separadas unas de otras por células fluidas, obstáculos o deflectores. Estas regiones representan físicamente los volúmenes que están ocupados por el gas. El algoritmo de solución VOF no resuelve la dinámica del gas en estas regiones; en cambio, los trata como regiones de presión uniforme, que normalmente es una excelente aproximación. La presión se utiliza como condición límite en el interfaz líquido / gas.

La evaluación de la presión (y posiblemente la temperatura) de las regiones vacías depende del modelo de la región vacía. Hay cuatro tipos de regiones vacías utilizadas en FLOW-3D:

- Regiones de presión fija
- Regiones de cavitación
- Burbujas adiabáticas
- Burbujas homogéneas

Algunos cálculos pueden combinar diferentes modelos para diferentes regiones o incluso para la misma región vacía en diferentes momentos.

El uso de una sola presión para cada región vacía conectada presupone que las ondas de sonido atraviesan la región en tiempos mucho más cortos que los asociados con cambios en la configuración del fluido incompresible circundante. Sin embargo, estas suposiciones son lo suficientemente precisas para muchos problemas interesantes.

Las burbujas que inciden en el límite de la malla pueden verse afectadas por las condiciones del límite. Por ejemplo, cualquier región vacía adyacente a un límite de presión fijo tomará automáticamente la presión de límite prescrita, independientemente de los cambios de volumen, la coalescencia o la ruptura. Las regiones vacías adyacentes a los límites de velocidad fija ganarán (o perderán) entalpía. Si el flujo es hacia la región computacional, la ganancia de entalpía se calcula a partir de las condiciones de límite especificadas. Para un límite de flujo de salida, es la entalpía en la burbuja que fluye. La referencia [Nichols-Hirt-1980] describe las bases teóricas de este modelo de burbuja.

## Regiones de vacío a presión constante

Cuando las densidades del fluido y el gas difieren significativamente, entonces pueden descuidarse pequeñas variaciones de presión dentro del gas y la inercia del gas en comparación con las del fluido. Por ejemplo, la relación de agua a densidades de aire es de aproximadamente 1000. En estos casos, cada región vacía puede tratarse como una región de presión uniforme. En FLOW-3D, dichos flujos se describen con el modelo de un fluido con límites de gas tratados como superficies libres.

Si el gas no experimenta cambios volumétricos (es decir, compresión o expansión), se puede asumir además que la presión de las regiones vacías es constante en el tiempo. El modelo de región vacía a presión constante funciona bien, por ejemplo, para flujos de canal abierto donde el gas es aire a presión atmosférica. Otro ejemplo es el llenado de un molde de arena con metal líquido donde la porosidad de la arena asegura que el aire en el molde se escape sin quedar atrapado.

Si el vacío está conectado a un límite de presión especificado, el vacío asumirá la presión especificada en ese límite, que puede ser una función del tiempo.

# Modelo de burbuja homogénea

En esta sección describimos una extensión del modelo de burbuja adiabática que agrega cambios no adiabáticos de masa y energía. La transferencia de calor de sólido a vacío proporciona un intercambio de calor entre el gas en una burbuja y los obstáculos sólidos expuestos a la burbuja. Los intercambios de masa y energía resultantes de los cambios de fase en la superficie de la burbuja se pueden incluir en los casos en que la burbuja de gas se compone de vapor líquido.

Las burbujas homogéneas tienen una formulación simple y robusta que es consistente con las propiedades termodinámicas de líquidos utilizadas en FLOW-3D. El modelo se conoce como el modelo de burbuja homogénea. La nomenclatura pretende resaltar el hecho de que la presión y la temperatura del gas en una burbuja son espacialmente uniformes (es decir, homogéneas), pero estos valores pueden variar con el tiempo. Puede haber muchas de estas burbujas en un cálculo, cada una con su propia temperatura y presión.

La ecuación de estado de una burbuja es la ecuación de gas ideal,

$$p = (Y - 1)\rho C_v^{vap}$$

Ecuación 1.39

Donde

- *p* es la presión de la burbuja
- $\rho$  es la densidad del gas
- $C_{v}^{vap}$  es el calor específico a volumen constante del vapor, y
- T es la temperatura del vapor, que debe estar en una escala absoluta.

•  $\gamma$  es la relación de calores específicos para el gas

Si no hay fuentes de masa o energía para una burbuja, se comportará como si fuera adiabática, cambiando la presión de algún estado inicial  $(p_0V_0)$  a un nuevo estado (p, V) según

$$p = p_0 \left(\frac{V_0}{V}\right)^Y$$

Ecuación 1.40

Cuando se producen cambios de fase, es necesario tener una relación analítica que exprese la presión de saturación de un vapor en términos de su temperatura. En FLOW-3D, el valor predeterminado para esta relación es la ecuación de Clapeyron que da  $P_{SAT}$  en función de la temperatura T.

$$p^{sat} = PV1 \exp\left[\frac{-\left(\frac{1}{T} - \frac{1}{TV1}\right)}{TVEXP}\right]$$

Ecuación 1.41

donde:

- (PV1, TV1) es el punto de saturación
- *TVEXP* es un exponente dado por

$$TVEXP = \frac{(\gamma - 1)C_{v}^{vap}}{CLHV}$$

Ecuación 1.42

donde CLHV1 es el calor de transformación (calor latente) de evaporación.

La tasa de cambio de fase generalmente se modela como proporcional a algo que mide la desviación de las condiciones de saturación. Una formulación típica [Theofanouset-al-1969] que se basa en la teoría cinética es

Net mass transfer = 
$$\sqrt{\frac{M}{2\pi R}} \left( a_{vap} \frac{P_i^{sat}}{\sqrt{T_i}} - a_{con} \frac{P_v}{\sqrt{T_v}} \right)$$
  
Ecuación 1.43

donde:

- *M* es el peso molecular del vapor
- *R* es la constante del gas
- *T* es la temperatura
- Los subíndices sin l para líquidos y v para vapor
- Los super indices sat en  $P_l$  indican la presión de saturación correspondiente a la temperatura del liquido
- $\alpha_{vap}$  y  $\alpha_{con}$  son los coeficientes de acomodación para la evaporación y la condensación.

El origen de esta expresión es que el flujo de masa (por ejemplo, la condensación en una superficie líquida) debe ser proporcional a la densidad de vapor local y la velocidad local de las moléculas en la superficie. Suponiendo una distribución de velocidad maxwelliana, la velocidad local en la superficie es [Plesset-Prosperetti-1976],

$$u_{in} = \sqrt{\frac{RT}{2\pi}}$$

Ecuación 1.44

Combinando este resultado con la ecuación de estado de vapor se obtiene el segundo término (condensación) en la expresión de transferencia de masa Ecuación 1.40. Al término de evaporación se llega de manera similar. El coeficiente de acomodación  $\alpha_{con}$ , es la probabilidad de que las moléculas de vapor que golpean la superficie del líquido sean capturadas. Con esta interpretación, los coeficientes de acomodación generalmente deben ser menores o iguales a la unidad.

En la mayoría de los casos, se supone que los coeficientes de adaptación a la evaporación y la condensación son iguales, pero no hay ninguna razón teórica por la que esto sea así. Además, no hay predicciones teóricas para estos valores. Vale la pena señalar aquí que esta expresión es para la transferencia de masa "neta" de líquido a vapor. No dice nada sobre la posibilidad de intercambios moleculares entre el líquido y el vapor que transfieren energía sin un intercambio de masa neta. Para los fines actuales, hemos optado por simplificar la tasa de cambio de fase a

Net mass transfer = 
$$RSIZE \sqrt{\frac{M}{2\pi RT_{bdy}}} (P_l^{sat} - P_v)$$
  
Ecuación 1.45

donde RSIZE es un "coeficiente de alojamiento" neto  $T_{bdy}$  y es la temperatura promedio del líquido a lo largo de la superficie de la burbuja.

#### Zonas de cavitación

Las regiones de cavitación se abren en el fluido cuando la presión local cae por debajo de un valor crítico  $P_{CAV}$ . La tasa inicial de creación de vacíos puede controlarse mediante el parámetro de entrada *CAVRT*. La nueva región vacía se trata como una burbuja de presión fija con una presión igual a la presión de cavitación. Este último, es un parámetro fijo y en la actualidad no depende de la temperatura.

Las burbujas de cavitación pueden coexistir con otros tipos de regiones vacías en un solo cálculo.

### Regiones de vacío de presión variable

En situaciones en que un volumen de gas queda atrapado en una región confinada, la presión del gas ya no puede considerarse constante. Por ejemplo, una burbuja de aire sumergida que se levanta en el agua puede tener una presión variable.

FLOW-3D puede tratar una o más regiones vacías en su modo incompresible de un fluido. El modelo de burbuja evalúa la presión P en cada región vacía en función del volumen V de la región vacía utilizando el modelo isoentrópico de expansión o compresión en el que  $PV^{\gamma}$  es constante. Aquí  $\gamma$  es normalmente el exponente isoentrópico definido como la relación de calores específicos  $\gamma = C_P/C_V$ 

Estrictamente hablando, este modelo de la presión de la burbuja solo es válido si la región vacía se comporta como un gas perfecto que experimenta cambios adiabáticos reversibles.

Las regiones vacías pueden comportarse de formas más complejas que las simples expansiones y contracciones. Pueden romperse o unirse, y pueden recibir o perder masa y energía en los límites de la malla. Todos estos procesos son aproximados por el modelo de presión de burbuja en FLOW-3D. La presión de una burbuja unida se determina por el volumen que pesa las presiones de las burbujas aisladas anteriores. Una burbuja que se rompe crea nuevas burbujas a su antigua presión. Estos procesos violan la condición  $PV^{\gamma}$  = constante, pero como solo ocurren en momentos discretos, se espera que el error acumulado permanezca pequeño.

Si una burbuja no se une ni se rompe, la relación  $PV^{\gamma}$  determina la nueva presión.

# **b. RESIDUOS DE VAPORIZACION**

Otros fluidos en superficies libres de un fluido pueden evaporarse o condensarse cuando se usa un modelo de cambio de fase. Esto es válido para ambos casos donde el lado de gas de la interfaz es una presión constante o cuando es una región de burbuja homogénea. Si el fluido contiene uno o más solutos, la concentración de los solutos debe cambiar en respuesta a la ganancia o pérdida de líquido. Típicamente, los solutos se vuelven más concentrados debido a la evaporación del líquido.

En el caso de evaporación o condensación, cualquier concentración escalar asociada con el fluido tendrá su concentración alterada por el cambio de fase. Si un elemento de superficie está lleno menos de la mitad de líquido, entonces el cambio de concentración se extiende hacia el vecino principal del elemento de superficie en la medida en que la región de concentración sea igual a la mitad del espesor del elemento de superficie.

Si se produce una evaporación suficiente y la concentración de soluto llega a ser lo suficientemente alta, puede resultar en una superficie de la piel o puede formarse un residuo en una superficie sólida si el líquido se evapora por completo. Para que esto se simule en FLOW-3D, se debe seleccionar el modelo de residuo. La activación de este modelo hace que el soluto forme un residuo que no se mueve una vez que su concentración alcanza una densidad de empaquetado máxima definida por el usuario. Si

hay más de un soluto presente, el modelo de residuo registrará el total de todas las contribuciones de soluto al residuo.

# c. MODELO DE FLUJO FLOTANTE

Muchas situaciones de flujo pueden aproximarse utilizando fluidos incompresibles, pero requieren una evaluación de la influencia de las fuerzas de flotación asociadas con pequeñas variaciones de densidad. En tales casos, la densidad generalmente se representa como una función de la temperatura solamente. La solidificación y la macro-segregación también se pueden tener en cuenta en el modelo de flujo flotante

FLOW-3D permite una solución a estos flujos, acoplando su algoritmo de solución de flujo incompresible con la solución de la ecuación de transporte de energía y con una evaluación local de la densidad en función de la temperatura. El modelo funcionará con cálculos de un solo fluido, con o sin una superficie libre, y para problemas de dos fluidos incompresibles. Además, el modelo de compresibilidad limitada puede emplearse con el modelo de flujo flotante. Las fuerzas de flotación se incluyen automáticamente en los fluidos compresibles.

Cuando se usa la opción de flujo flotante, la ecuación de continuidad Ecuación 1.1 o Ecuación 1.5, las ecuaciones de transporte de momento Ecuación 1.9, y la ecuación de transporte de energía interna Ecuación 1.21, se resuelven. Para problemas de superficie libre o de dos fluidos incompresibles, la ecuación de fracción de fluido Ecuación 1.19, también se resuelve.

La densidad del fluido se determina en el modelo de flujo flotante a partir de la fracción y temperatura del fluido local como

$$\rho = F \ \rho_1(T) + (1 - F) \ \rho_2(T)$$
  
Ecuación 1.46

Donde

$$\rho_1(T) = RHOF [1 - THEXF1(T - T^*)]$$
  
Ecuación 1.47  
$$\rho_2(T) = RHOFC [1 - THEXF2(T - T^*)]$$

$$Ecuación 1.48$$

En la Ecuación 1.48 la  $T^*$  es una temperatura de referencia a la cual el fluido #1 tiene la densidad de entrada *RHOF* y la densidad del fluido #2 es RHOFC. Los coeficientes de expansión térmica volumétrica para estos fluidos son las constantes *THEXF1* y *THEXF2*, respectivamente. Las fuerzas de flotación surgen de los desequilibrios del gradiente de presión y las fuerzas del cuerpo en la Ecuación 1.9, que incluyen aceleraciones no inerciales y gravitacionales.

La temperatura del fluido se determina a partir de la ecuación de transporte para la energía interna con el supuesto de temperaturas locales iguales en casos de dos fluidos.

# d. GENERACIÓN DE GAS EN LOS MACHOS Y FLUJO DEL MISMO EN MACHOS Y MOLDES DE ARENA

Los defectos de los gases se encuentran a menudo en las piezas de fundición de arena que surgen del gas generado por la descomposición térmica del aglutinante de arena en molde y machos. Existe un modelo computacional disponible para predecir la generación de gas y su transporte dentro de los machos. El gas se trata como compresible para tener en cuenta los escenarios deficientes de ventilación del macho y para el transporte a través de las regiones del macho de gradientes de temperatura pronunciados. El modelo considera la verdadera geometría de moldeo y las ubicaciones reales de ventilación del macho y se puede usar para predecir la cantidad de gas que entraría en el metal líquido desde cualquier ubicación en la superficie del macho y molde.

Un macho se trata como un objeto sólido en el programa sin porosidad, de modo que ningún metal líquido pueda fluir hacia su interior. El modelo de gas de macho trata el objeto como si fuera un material poroso en el que el gas se puede generar, fluir y pasar dentro o fuera de sus límites utilizando condiciones de contorno especiales como se describe a continuación.

El modelo de gas de macho supone que el aglutinante de arena se convierte completamente en gas cuando el aglutinante alcanza una temperatura suficientemente alta. Se piensa que el gas es ideal y tiene una composición fija con la constante de gas  $R_{cg}$ . La constante de gas se puede deducir de los experimentos en los que el gas se recolecta en un aparato de volumen fijo y se mide la presión del gas. Del volumen estándar medido  $V_{std}$ , y la masa inicial del aglutinante  $m_b$ , la constante de gas es

$$R_{cg} = \frac{p_{std}}{T_{std}} \frac{V_{std}}{m_b}$$

Ecuación 1.49

La velocidad microscópica del gas de macho  $\overrightarrow{u_{cg}}$  se rige por la ecuación de flujo en medios porosos:

$$\overrightarrow{u_{cg}} = -\frac{K}{\mu} \nabla p_{cg}$$

Ecuación 1.50

donde:

- *K* es la permeabilidad de la arena
- $\mu$  es la viscosidad del gas
- $p_{cg}$  es la presión del gas de macho

Los términos inerciales macroscópicos son pequeños para las condiciones típicas del flujo de gas del macho y no están incluidos en Ecuación 1.50. El coeficiente de arrastre  $K^{-1}$  tiene un término de Darcy lineal y un término de Forschheimer cuadrático:

$$K^{-1} = a \frac{\mu_{cg}}{\rho_{cg}} \frac{(1-\Phi)^2}{\Phi^2} + b \frac{1-\Phi}{\Phi} u_{cg}$$

Ecuación 1.51

donde:

- $\phi$  es la porosidad del macho
- $\mu_{cg}$  es la viscosidad del gas
- $\rho_{cq}$  es la densidad del gas
- *a y b* Son los coeficientes de pérdida de flujo lineal y cuadrático específicos de arena.

La densidad del gas de macho se rige por la ecuación de transporte másico:

$$\frac{\partial \rho_{cg}}{\partial t} + \nabla \left( \rho_{cg} \vec{u}_{cg} \right) = -\frac{d\rho_b}{dt}$$
Ecuación 1.52

Dónde  $\mu_{cg}$  y  $\rho_b$  son el gas de macho microscópico y las densidades de aglomerante de macho macroscópico. Dado que el gas del macho es compresible, incluso en ausencia de fuentes de gas, puede haber una expansión térmica y flujo del aire inicial en el macho a medida que el macho se calienta.

La densidad del gas de macho está aún más limitada por la ley del gas ideal:

$$p_{cg} = R_{cg}\rho_{cg}T$$
*Ecuación 1.53*

donde se supone que la temperatura del gas es igual a la temperatura central local. Esta es una buena aproximación debido al alto contenido de calor del material del macho

Dado que se supone que las temperaturas del macho y del gas son iguales, y la temperatura del macho ya está calculada por el solucionador de la transferencia de calor, la ley del gas ideal se puede usar para calcular la presión del gas con su densidad definida por la Ecuación 1.52

La conversión del aglutinante sólido a gas se describe mediante una ecuación de Arrhenius,

$$\frac{d\rho_b}{dt} = -\rho_b C_b exp\left(-\frac{E_b}{RT}\right)$$
Ecuación 1.54

donde:

sólido en comparación con el del gas.

 $\rho_b$  es la densidad del aglutinante sólido,

- $C_b$  es la constante de velocidad de reacción cuyo valor se obtiene empíricamente,
- $E_h$  es un componente de energía de enlace
- R es la constante universal de los gases
- *T* es la temperatura central

La fuente de gas puede exhibir un comportamiento oscilatorio no físico asociado con el tamaño discreto de los elementos computacionales. Para aliviar este problema, se utiliza un esquema de subdivisión simple en cada celda computacional. La densidad del aglomerante sólido se almacena en los nodos de las sub-células, mientras que la temperatura de la sub-célula se obtiene a través de una interpolación lineal del campo de temperatura de los nodos de la malla principal.

Debido a que el modelo de gas de macho se usa al mismo tiempo que un modelo de relleno de molde, es posible que el flujo de gas en los machos sea lo suficientemente rápido como para limitar el tamaño de  $\Delta t$  computacional (según la condición de estabilidad de Courant) a un valor más pequeño de lo que se necesita para la simulación de llenado, lo que resulta en tiempos de cálculo más largos. Para contrarrestar esta posibilidad, se ha incorporado un esquema de sub-tiempo paso a paso en el modelo de gas de macho. Esto es posible porque el modelo está acoplado a la simulación de llenado de metal a través de las condiciones de contorno en la superficie exterior del macho. Si se encuentra que el tamaño de  $\Delta t$  para el modelo de gas de macho debe ser más pequeño que el de la simulación de llenado, entonces el tamaño de  $\Delta t$  para los cálculos de gas de macho se reduce a un valor estable y el modelo se ejecuta para varios pasos de sub-tiempo con la solución térmica fija y de flujo en el metal. El tamaño del paso de sub-tiempo es una fracción entera del tamaño de  $\Delta t$  principal, por lo que los cálculos de gas se pueden repetir para ese número entero de pasos para que la solución de gas avance hasta el momento correcto.

Puede haber un flujo de gas dentro o fuera del macho y en los límites del material del macho. Este intercambio se trata como una condición límite para el modelo de gas de macho. El paso del gas a través del límite del macho depende de lo que se encuentre fuera del macho. Por ejemplo, si la superficie del macho está expuesta al aire, entonces el gas puede fluir a través del límite en cualquier dirección dependiendo de la diferencia de presión.

Si hay metal líquido en la superficie del macho, entonces se permite que el gas salga del macho cuando su presión es mayor que la presión del metal en esa ubicación, pero no se permite que ningún metal ingrese al macho. Si el metal ya se ha solidificado en la superficie del macho, entonces no se permite que el gas fluya a través del límite en esa ubicación.

Otra condición límite se produce en las superficies de impresión del macho, es decir, cuando una superficie del macho está en contacto con otra parte sólida del molde. En estas ubicaciones de superficie, el gas normalmente no fluye a menos que se hayan cortado canales en el molde para permitir la ventilación. El modelo de gas de macho tiene una opción para permitir la ventilación en las superficies de impresión.

#### e. MODELO DE MOLDE PERMEABLE

La arena es un material común para hacer moldes de fundición. Se "moldea" fácilmente en cualquier forma, es reciclable y tiene propiedades estructurales y térmicas adecuadas.

Además, un molde de arena es permeable, lo que permite que el aire que inicialmente reside en la cavidad se escape durante el vertido. Sin embargo, el escape del aire ocurre a una cierta velocidad que, si es demasiado baja, puede resultar en una acumulación significativa, lo que ralentiza el proceso de llenado. Existe un modelo simple para el escape de aire a través de un molde permeable en FLOW-3D que proporciona los medios para dar cuenta de la acumulación de la contrapresión.

El caudal de aire Q a través del molde se calcula mediante una formulación lineal:

$$Q = AKdP$$

Ecuación 1.55

donde:

- A es la superficie del molde que está expuesta al aire,
- *K* es la permeabilidad del molde
- dP Es la caída de presión entre el aire dentro y fuera del molde.

La permeabilidad del molde K se estima a partir de la porosidad del molde POR, el tamaño promedio de grano de arena d, el espesor promedio del molde L y la viscosidad del aire  $\mu$ 

$$K = \left(\frac{POR}{1 - POR}\right)^2 \frac{d^2}{180\mu l}$$

Ecuación 1.56

El modelo de molde permeable se usa junto con el modelo de burbuja adiabática, en el que cada región de aire, o burbuja, tiene una presión uniforme que es una función del volumen de la burbuja. El caudal Q se evalúa para cada región de aire utilizando la presión de la burbuja y su área de superficie con el molde. Se supone que la presión ambiental es constante y la misma para todas las regiones aéreas.

Durante un pequeño incremento de tiempo dt, la contrapresión en una región de aire  $P_{air}$ , los cambios debidos a la compresión por el metal entrante dV y la ventilación a través del molde Qdt da:

$$dP_{air} = P_{air} \left( 1 + \gamma \frac{dV - Qdt}{V_{air}} \right)$$

Ecuación 1.57

donde:

•  $\gamma$  es la relación de los calores específicos del gas (1.4 para el aire)

•  $V_{air}$  es el volumen de aire

Actualmente no se tiene en cuenta el revestimiento del molde.

## f. SEGUIMIENTO DE DEFECTOS

Las propiedades mecánicas de una pieza de fundición pueden depender en gran medida de la "limpieza" del metal con respecto a las películas de óxido, el aire y otras inclusiones extrañas que puedan quedar atrapadas dentro del metal durante el proceso de llenado. En esta sección, se describe una fuente de defectos y un esquema de seguimiento que proporciona una predicción cualitativa de defectos de fundición originados por la turbulencia de la superficie [Barkhudarov-Hirt-1998]. El modelo de defectos también se acopla con el modelo de fundición de poliestireno perdida para predecir posibles defectos que surjan del residuo que permanece en las superficies metálicas después de que la poliestireno se haya descompuesto.

Las inclusiones en la superficie libre y del residuo de poliestireno perdido se representan como cantidades separadas. En el modelo de defectos de superficie libre, la cantidad se acumula en las superficies libres a una tasa de generación de defectos constante *DFTSRF*. El residuo de poliestireno se incrementa en una cantidad proporcional a la masa de poliestireno degradada con el coeficiente de proporcionalidad definido por la tasa de generación de residuos *DFTFOB*. Una ecuación de transporte se resuelve numéricamente para cada cantidad con términos de advección y difusión, similar a la dada por la Ecuacion 1.54. Se utiliza un esquema de segundo orden en el espacio, que preserva la homogeneidad para aproximar los términos de advección para una mayor precisión. La difusión de las inclusiones suele ser pequeña y, por defecto, está desactivada, pero puede incluirse definiendo valores positivos para el coeficiente de difusión molecular y / o el multiplicador del coeficiente de difusión turbulenta, que es el número Schmidt inverso, para el seguimiento de defectos y Modelos perdidos de poliestireno.

Ambas cantidades representan la concentración del material contaminante. La probabilidad de un defecto debido a la contaminación es proporcional a la concentración. Los defectos son más probables en lugares con picos de concentración altamente localizados de cualquier cantidad.

En este punto, el modelo no incluye efectos de resistencia a la flotabilidad ni a la resistencia de la película de óxido. Tampoco se incluyen fenómenos como la película de óxido que se adhiere a las paredes del molde y el residuo de poliestireno que se escapa a través del molde de arena porosa. Se puede incluir la absorción de los productos líquidos de la descomposición de la poliestireno en el proceso de fundición de poliestireno perdida.

Al concluir una simulación, la distribución espacial de las concentraciones de inclusión indica las ubicaciones donde es probable que se encuentren los defectos. En la mayoría de los casos, la mayoría de las inclusiones se encuentran en el último lugar para llenar, como se esperaría. En otras palabras, los contaminantes se acumulan en el frente

de metal y se empujan a lo largo hasta que no hay otro lugar para que vayan. Sin embargo, son más interesantes las situaciones en las que se encuentran dos frentes, que atrapan las inclusiones de la superficie en el interior del metal, o cerca de las esquinas donde se pueden desarrollar regiones de recirculación de flujo. Incluso la circulación que permanece en el metal después de que se haya llenado un molde puede redistribuir los contaminantes generados en la superficie.

Sin comparaciones experimentales detalladas para correlacionar las predicciones de este tipo de modelo con defectos reales, es imposible asignar ningún significado a los valores absolutos del escalar. Por lo tanto, los coeficientes de tasa pueden tener valores positivos arbitrarios. Sin embargo, los resultados cualitativos, incluso de los casos de prueba más simples, revelan una cantidad considerable de información útil sobre los procesos responsables de la generación de defectos y su distribución final en una pieza fundida.

# g. MODELO DE FLUJO A LA DERIVA

En fluidos compuestos de múltiples componentes, por ejemplo, fluidos / partículas, fluidos / burbujas, fluidos / mezclas de fluidos, donde los componentes tienen diferentes densidades, se observa que los componentes pueden asumir diferentes velocidades de flujo. Las diferencias de velocidad surgen porque las diferencias de densidad dan como resultado fuerzas corporales no uniformes. A menudo, las diferencias en las velocidades pueden ser muy pronunciadas, por ejemplo, grandes gotas de lluvia que caen a través del aire o la grava que se hunde en el agua. Sin embargo, en muchas condiciones, las velocidades relativas son lo suficientemente pequeñas como para describirlas como una "deriva" de un componente a otro. Los ejemplos son polvo en el aire y limo en el agua.

La distinción de "deriva" tiene que ver con si la inercia de un componente disperso que se mueve en un componente continuo es significativa o no. Si la inercia del movimiento relativo se puede ignorar, y la velocidad relativa se reduce a un equilibrio entre una fuerza motriz (por ejemplo, gravedad o un gradiente de presión) y una fuerza de resistencia opuesta entre las componentes, entonces podemos hablar de un "flujo a la deriva". Las velocidades de deriva son las principales responsables del transporte de masa y energía. También se puede transportar algo de impulso, pero esto suele ser bastante pequeño y se ha descuidado en el modelo de deriva FLOW-3D.

La idea detrás del modelo de deriva es que el movimiento relativo entre componentes se puede aproximar como un continuo, en lugar de mediante elementos discretos (por ejemplo, partículas). Esto mejora la eficiencia computacional, ya que no es necesario computar la necesidad de rastrear el movimiento y la interacción de elementos discretos.

Hay cuatro situaciones físicas diferentes en las que se puede emplear una velocidad de deriva en FLOW-3D:

- Un fluido, flujos de densidad variable, donde el fluido es una mezcla de dos componentes que tienen densidades  $\rho_1 y \rho_2$ .
- Un fluido con solidificación, donde el fluido es una mezcla de líquido y sólido con densidades ρ<sub>1</sub>y ρ<sub>2</sub>.
- Dos fluidos incompresibles con densidades  $\rho_1 y \rho_2$ .
- Un gas compresible con un componente incompresible. En este caso, la densidad del gas compresible viene dada por una ecuación de estado, mientras que el material incompresible tiene densidad ρ<sub>1</sub>, que siempre se supone que es mucho mayor que la densidad del gas.

La formulación de la velocidad relativa en la aproximación de la deriva procede de la siguiente manera. Supongamos que un flujo se compone de dos componentes o fases discretas, una la fase continua y la otra la fase dispersa, que es discontinua y está rodeada por la fase continua. Tenga en cuenta que el mismo sistema de fluidos puede tener configuraciones opuestas. Para el caso de una pequeña cantidad de agua que contamina un gran volumen de combustible diésel, el agua es la fase dispersa, a la inversa, cuando pequeñas cantidades de combustible diésel están presentes en el agua, el combustible diésel es la fase dispersa.

Define  $\mathbf{u} = f_1 \mathbf{u}_1 + f_2 \mathbf{u}_2$  tal que  $\nabla \cdot \mathbf{u} = 0$  para el flujo incompresible de un fluido de dos componentes. Las fracciones en volumen de los dos componentes que forman una mezcla se indican por  $f_1$  y  $f_2$  donde:

$$f_1 + f_2 = 1$$
*Ecuación 1.58*

Si suponemos que las dos fases son incompresibles, el equilibrio de momento para la fase continua es:

$$\frac{\partial u_1}{\partial t} + u_1 \nabla u_1 = -\frac{1}{\rho_1} \nabla P + F + \frac{K}{f\rho_1} u_r$$
  
Ecuación 1.59

mientras que para la fase dispersa es

$$\frac{\partial u_2}{\partial t} + u_2 \nabla u_2 = -\frac{1}{\rho_2} \nabla P + F - \frac{K}{(1-f)\rho_2} u_r$$
  
Ecuación 1.60

donde:

- $u_1$  y  $u_2$  representan las velocidades microscópicas de las fases continua y dispersa, respectivamente
- *f* es la fracción volumétrica de la fase continua
- La velocidad microscópica se refiere a la velocidad de cada fase sobre un volumen pequeño pero finito de fluido.
- F es la fuerza del cuerpo
- *K* es un coeficiente de arrastre que relaciona la interacción de las dos fases,
- u<sub>r</sub> es la diferencia de velocidad relativa entre las fases dispersa y continua:

El objetivo del modelo de flujo de deriva  $u_r = u_2 - u_1$  es calcular el movimiento de las dos fases en relación con la velocidad promediada en volumen  $\vec{u}$ . La velocidad media ponderada por volumen es

$$\vec{u} = f u_1 + (1 - f) u_2$$
Ecuación 1.61

La velocidad promedio ponderada por volumen se elige en lugar del promedio ponderado en masa porque la continuidad de masa se aplica automáticamente, sin alteración,

 $\nabla \vec{u}$ 

Ecuación 1.62

Restando la Ecuación 1.59 de la Ecuación 1.60 produce una ecuación para la velocidad relativa donde está el coeficiente de arrastre por unidad de volumen,

$$\frac{\partial u_r}{\partial t} + u_2 \nabla u_2 - u_1 \nabla u_1 = \left(\frac{1}{\rho_1} - \frac{1}{\rho_2}\right) \nabla P - \left(\frac{1}{(1-f)\rho_2} + \frac{1}{f\rho_1}\right) K u_r$$
  
Ecuación 1.63

El objetivo es determinar la velocidad relativa  $u_r$ , Si empleamos la *Ecuación 1.63* en su totalidad, esto constituiría un modelo de campo de dos velocidades para el flujo de dos componentes. Sin embargo, para simplificar, hemos optado por realizar la aproximación del flujo de deriva, es decir, suponemos que la velocidad relativa es casi constante y los términos adventivos se cancelan (por ejemplo, para una velocidad relativa pequeña). Bajo estos supuestos tenemos

$$\left(\frac{1}{\rho_1} - \frac{1}{\rho_2}\right) \nabla P = \left(\frac{f\rho_1 + (1-f)\rho_2}{f(1-f)\rho_1\rho_2}\right) K u_r$$
  
Ecuación 1.64

Como la velocidad relativa  $u_r$  se basa en las velocidades microscópicas de cada fase, entonces la fuerza de arrastre debe contener alguna información sobre la fracción de volumen de la fase suspendida. Por ejemplo, una suspensión con una cantidad infinitesimalmente pequeña de la fase suspendida producirá un intercambio de momento infinitesimalmente pequeño entre los componentes.

Si suponemos que la fase suspendida está compuesta de partículas que son del mismo tamaño, y que hay n de ellas en una unidad de volumen, entonces

$$u_r = \left(\frac{V_p}{K_p}\right) \frac{f(\rho_2 - \rho_1)}{\bar{\rho}} \nabla P$$

Ecuación 1.65

donde:

•  $V_p = (1 - f)/n$  es el volumen de una partícula

•  $K_p$  es el coeficiente de arrastre para una sola partícula que se mueve con una magnitud de velocidad  $|u_r|$  a través del fluido continuo

$$\bar{\rho} = f\rho_1 + (1-f)\rho_2$$

Ecuación 1.66

es la densidad media ponderada por volumen.

En el modelo se utiliza una dependencia cuadrática entre el coeficiente de deriva y la velocidad de flujo relativa. Si U es la magnitud de la velocidad relativa de la partícula que se mueve en un fluido continuo, entonces

$$K_p = \frac{1}{2} A_p \rho_c \left( C_d U + \frac{12\mu_c}{\rho_c R_p} \right)$$
  
Ecuación 1.67

donde:

- $C_d$  es un coeficiente de arrastre
- $R_p$  es el radio de partícula promedio y
- *A<sub>p</sub>* es el área de la sección transversal de la partícula, que se supone que es esférica

Debido a la aparición de U en la expresión Ecuación 1.61, se requiere una solución iterativa para resolver la velocidad relativa U, pero la iteración es bastante eficiente y no requiere mucho tiempo.

Cuando la fracción de volumen del material dispersado no se está desvaneciendo, el uso de una fuerza de arrastre de una sola partícula para calcular el intercambio de momento entre los componentes no es del todo correcto. La corrección utilizada con mayor frecuencia para tener en cuenta las interacciones partícula / partícula es una relación determinada experimentalmente conocida como correlación de Richardson-Zaki.

La correlación de Richardson-Zaki depende de la partícula de número de Reynolds  $R_e = (2\rho_c R_p U/\mu_c)$ . La correlación consiste en reemplazar la velocidad de deriva multiplicando el valor computado  $u_r$ , por la fracción de volumen del componente dispersado elevado a una potencia  $\zeta$ ,

$$u_r^{eff} = u_r(1-f)^{\zeta}$$

Ecuación 1.68

El exponente  $\zeta$  es el producto del coeficiente de Richardson-Zaki *rzmlt* y  $\zeta_0$ , es decir  $\zeta = rzmlt * \zeta_0$ , donde:

$$\begin{array}{ll} R_e < 1.0 & \zeta_0 = 4.35/R_e^{0.03} \\ 1.0 < R_e < 500 & \zeta_0 = 4.45/R_e^{0.1} \\ 500 < R_e & \zeta_0 = 2.39 \end{array}$$

El valor ajustado, o efectivo, se utiliza para el cálculo de todos los flujos de deriva. Esta correlación solo se utiliza en relación con el modelo de arrastre de partículas cuadráticas.

# h. MODELO DE CAMPO ELECTRICO

Para simular procesos físicos como el movimiento de partículas de masa cargada, dielectroforesis líquida y de partículas, y electroósmosis, se necesita una distribución de campo eléctrico. En FLOW-3D, el potencial eléctrico se resuelve utilizando la siguiente ecuación.

$$\nabla(K\nabla\Phi) = -\frac{\rho_e}{\varepsilon_0}$$

Ecuación 1.69

con el campo eléctrico calculado por

$$E = -\nabla \Phi$$

Ecuación 1.70

Donde  $\rho_e$  y  $\varepsilon_0$  son la densidad de carga libre (es decir, la carga eléctrica por unidad de volumen) y la permisividad del vacío o vacío (definida por *elperm* en FLOW-3D) respectivamente, mientras que K es la constante dieléctrica que varía espacialmente.

En los límites abiertos (es decir, los límites a través de los cuales puede pasar el flujo de fluido), se puede especificar una condición de aislamiento (es decir  $n\nabla\phi = 0$ , donde *n* es un vector normal en el límite en cuestión) o un valor específico del campo eléctrico. A los objetos sólidos se les pueden asignar potenciales dependientes del tiempo si son conductores. Alternativamente, un objeto puede ser un material dieléctrico con una constante dieléctrica asignada. En este caso, el potencial eléctrico se calcula dentro del objeto. Además, los dieléctricos sólidos pueden tener conductividades distintas a cero que soportan cargas y corrientes libres.

Opcionalmente, una ecuación de densidad de carga que incluye convección de carga, relajación de carga y fuentes de carga asociadas con propiedades eléctricas no uniformes que se resuelve simultáneamente con el potencial eléctrico.

La mayoría de la gente usa el sistema SI de unidades para problemas electrostáticos y electromagnéticos. En el sistema SI, la unidad de carga estándar es el coulomb y la unidad de potencial es el voltio. Las intensidades del campo eléctrico se miden en Newton / coulomb en el sistema SI. Cuando se utiliza el sistema de unidades CGS, es habitual expresar la carga y el potencial en las unidades "electrostáticas" de statvolt y statcoulomb, donde:

- 1 voltio (V) =  $3.336 \ 10^{-3}$  statvolt (statV)
- Las fuerzas eléctricas son entonces,
- 1 Newton = 1 C V  $m^{-1} = 10^5$  dinas
- 1 dina = 1 statC statV  $cm^{-1} = 10^{-5}$ Newton

Si las regiones fluidas o sólidas están conduciendo, entonces pueden desarrollarse cargas en respuesta al campo aplicado y a los cambios en la conductividad y las propiedades dieléctricas. Si se activa un modelo térmico, el calentamiento de Joule debido a estas corrientes se computará en todos los fluidos y sólidos conductores.

La solución de la ecuación de Poisson que gobierna el potencial se realiza mediante un método de iteración ADI o GMRES.

### i. MODELO DE MEDIOS GRANULARES DE ALTA CONCENTRACIÓN

La designación de flujo granular de alta concentración, significa que la fracción de volumen del material granular es del 50% o más. A altas concentraciones, existe un fuerte acoplamiento entre las partículas sólidas y el gas circundante, por lo que su mezcla se puede aproximar bien como un solo fluido compuesto. Esta mezcla se trata como un fluido incompresible que puede contener superficies libres que lo separan de las regiones de gas puro. Los efectos de dos fases dentro de la mezcla que resultan de las diferencias en las velocidades de los dos materiales se contabilizan utilizando una aproximación de flujo de deriva.

El fluido compuesto, en general, tiene una densidad no uniforme. La densidad de la mezcla fluida no puede cambiar con el flujo de la mezcla a granel debido a la suposición de incompresibilidad. Sin embargo, las variaciones de densidad sí se desarrollan debido al flujo relativo entre el sólido y el gas dentro de la mezcla como se describe en el modelo Drift-Flux.

El empaque sólido requiere la eliminación del gas desplazado cuando las partículas se aprietan juntas. En el modelo, esta pérdida de volumen de mezcla se trata como una pérdida de gas en la superficie libre de la mezcla. El gas puede escapar de una superficie libre debido al movimiento relativo entre el sólido y el gas. Además, la suposición de que la fracción de volumen del material sólido es siempre mayor o igual al 50% se usa para eliminar el gas en la superficie para restaurar la fracción de volumen sólido al 50%. En efecto, esta es la definición de la superficie libre. En cualquier caso, todo el gas eliminado se transfiere a una burbuja de gas adyacente.

Los sólidos discretos solo se pueden empaquetar hasta un límite de empaquetamiento cerrado específico cuya densidad sea menor que la del sólido puro. Un valor típico para la fracción de volumen sólido de partículas esféricas compactas, de tamaño uniforme, es  $f_s^{pk} = 0.63$ . En el modelo Drift-Flux hay una opción disponible que define la fracción sólida máxima que puede ocurrir. Este límite se impone forzando la velocidad de deriva a cero cuando se alcanza la fracción de volumen límite. Este tratamiento es similar a la limitación de la velocidad de deriva por la correlación de

Richardson-Zaki, que es una explicación empírica de las interacciones partícula-partícula que ocurren en fracciones de mayor volumen de material disperso.

Se sabe que la tensión de cizallamiento en materiales granulares en altas concentraciones es mucho mayor que la tensión de cizallamiento viscosa del fluido que transporta el sólido dispersado. El trabajo extenso, que comienza con el trabajo de Bagnold en 1941, se ha resumido y ampliado a un rango más amplio de condiciones experimentales en [Mih-1999]. En altas concentraciones, la principal contribución a la tensión de corte se debe a las fuerzas de impacto (es decir, la colisión) entre los granos. Una segunda contribución, y en general, menor, surge del sólido distribuido que afecta al fluido. La expresión de Mih para la viscosidad dinámica efectiva (Ecuación 1.38) en [Mih-1999]) es,

$$\mu_{eff} = 7,8\mu\left(\frac{\lambda^2}{1+\lambda}\right) + \rho_s\left(\frac{0.015}{1+0.5\frac{\rho}{\rho_s}}\right)\left(\frac{1+e}{(1-e)^{0.5}}\right)(\lambda d)^2 \left|\frac{du}{dy}\right|$$
  
Ecuación 1.71

Donde:

- $\mu$  y  $\rho$  son la viscosidad y densidad del gas,
- $\rho_s$  es la densidad de la arena,
- e es el coeficiente de restitución asociado con los impactos de grano,
- *d* es el diámetro del grano
- $\lambda$  es una función de la fracción de volumen sólido máximo  $f_s^{mx} = 0.63$  dividida por la fracción de volumen sólido  $f_s$ ,

$$\lambda = \frac{1}{\left(\frac{1.032f_{S}^{ms}}{f_{S}}\right)^{1/3} - 1}$$

Ecuación 1.72

Físicamente,  $\lambda = d/S$  donde *S* se define como la distancia promedio entre centros de grano menos su diámetro *d*. Cuando el grano está compactado, S = 0 y  $\lambda$  se vuelve infinito.

Para nuestros propósitos, la tasa de corte simple du/dy se reemplaza por la magnitud de la tasa de tensión  $e_{ij}$  y un coeficiente típico de restitución (para arena 0.7 se asume como un buen valor general). Con estos cambios, Ecuación 1.71 se reduce a

$$\mu_{eff} = 7.8\mu \left(\frac{\lambda^2}{1+\lambda}\right) + 0,066\rho_s (\lambda d)^2 |e_{ij}|$$
  
Ecuación 1.73

Esta expresión es una viscosidad de "engrosamiento por cizallamiento". El carácter de engrosamiento surge del mecanismo de impacto entre los granos, un proceso denominado salación. Es decir, los granos de movimiento rápido que fluyen sobre un lecho de granos asentados o de movimiento lento se golpearán entre sí, lo que provocará

que los granos de movimiento lento sean empujados hacia arriba en la corriente en movimiento, donde absorben el impulso de la corriente a través de colisiones adicionales.

El término de viscosidad de impacto (el segundo término en la Ecuación 1.73) tiene la forma genérica de una viscosidad de gran simulación de Eddy (LES). Dado que la expresión deriva empíricamente en la Ecuación 1.73, implica condiciones de flujo turbulento, y no es necesario usar un modelo de transporte de turbulencia con el modelo de flujo granular.

Un elemento importante en el modelado del flujo de arena / aire en dos fases, es tener un mecanismo para que la arena acumule y resista el movimiento bajo presiones aplicadas. Para este propósito, se utiliza un tipo de modelo de resistencia al flujo que se basa en observaciones de arena soplada. A medida que el material sólido se acumula a una densidad en la que los granos individuales comienzan a tocarse, se hace más difícil que la mezcla de sólido / gas fluya. Este estado se conoce a veces como un bloqueo mecánico y tiene una fracción de volumen típica de  $f_s^{jam} = 0.61$ . En densidades sólidas aún más altas, correspondientes al empaquetamiento sólido, los granos permanecen en contacto con sus vecinos y no pueden fluir en absoluto.

De acuerdo con [Bagnold-1941], las ganancias que se han asentado y compactado en un lecho solo pueden ser desalojadas o arrastradas hacia una región de arena que fluye si la arena que fluye tiene una velocidad que excede un valor de umbral, *uthrs*. Basado en estudios empíricos y una teoría aproximada, que incluye la magnitud g de la gravedad y el d diámetro del grano, la velocidad de umbral es

$$u_{thrs} = 1.41C_{drg}\sqrt{d|g|(\rho_s - \rho_a)/\rho_a}$$
  
Ecuación 1.74

Donde  $C_{drg} = 1$ , La inclusion de  $C_{drg}$  en esta expresión es permitir un ajuste futuro a la velocidad de umbral para posiblemente tener en cuenta los efectos de cohesión entre los granos.

Se supone que la resistencia de empaquetamiento en un elemento de malla que contiene fluido es cero, si la velocidad del fluido en el elemento es mayor que este valor de umbral o si la fracción de volumen del material sólido es menor que la necesaria para el bloqueo mecánico.

Para fracciones de volumen más grandes que el valor de interferencia y velocidades menores que el valor umbral, se agrega una resistencia de flujo al lado derecho de la ecuación del momento del fluido como una aceleración negativa dada por

$$-S_{drg} \sqrt{\frac{|g|}{4d}} \left(\frac{u_{thrs} - |\vec{u}|}{u_{thrs}}\right) \left(\frac{f_s - f_s^{jam}}{f_s^{mx} - f_s^{jam}}\right) \vec{u}$$
  
Ecuación 1.75

Donde  $S_{drg}$  es un coeficiente no dimensional de unidad de orden. Esta resistencia es proporcional a la velocidad de flujo y también proporcional a la fracción de volumen de arena.

Cuando la fracción de volumen de material sólido alcanza o supera un valor de  $0,99f_s^{pk}$ , la velocidad de flujo se establece en cero y se considera que el material está completamente compactado. Una excepción a esta regla es en elementos de superficie que tienen una pendiente mayor que un ángulo de reposo definido como el ángulo entre la normal de la superficie interior y la dirección de la fuerza del cuerpo (por ejemplo, la gravedad). En tales elementos no hay resistencia al flujo.

Hay excepciones al ángulo de reposo y al cierre de los límites de compactación que le dan al modelo actual más realismo para el flujo granular. Una excepción es la inclusión de un ángulo de movimiento elegido como 2 grados más grande que el ángulo de reposo. Cuando una superficie está compactada, y en reposo, no puede fluir hasta que la pendiente de la superficie es mayor que el ángulo de movimiento, pero luego continuará fluyendo solo mientras la pendiente permanezca mayor que el ángulo de reposo. El ángulo de movimiento actúa como un tipo de fricción estática que debe superarse antes de que se produzca el flujo. Se utiliza un concepto similar de "fricción estática" en el interior del fluido compuesto para descompactar una región previamente compactada.

En un límite de pared sólida donde el material granular puede estar cayendo (a la deriva) del límite, lo que resulta en una fracción de volumen sólido inferior al 50%, es necesario un tratamiento especial. En este caso, inicialmente no hay superficie libre, por lo que uno debe crearse un proceso de "cavitación". Cuando se encuentra una fracción sólida inferior al 50% en una ubicación que no se identifica como una superficie libre, se permite que la presión en esa ubicación del elemento de la rejilla se relaje hacia la presión de gas externa, y el elemento de la rejilla se marque como un elemento especial en el que se define la presión y no se impone la incompresibilidad. Esta acción permite que el elemento se abra y se convierta en una nueva región de gas puro.

La fracción de volumen de compactación máximo  $f_s^{pk} = 0.63$  es una variable de entrada que se puede cambiar. Si se realiza un cambio, las fracciones sólidas correspondientes  $f_s^{jam}$  y  $f_s^{mx}$ se ajustan automáticamente para tener los mismos valores proporcionales con el cambio  $f_s^{pk}$ .

El modelo de flujo granular descrito aquí tiene algunas limitaciones, como no permitir un flujo detallado de gas a través de sólidos compactados. Sin embargo, produce resultados útiles con muchas características realistas. Por ejemplo, en aplicaciones para la fabricación de machos de arena para fundición de metales, se ha obtenido muy buen resultado cualitativo con datos experimentales.

# j. MODELO SOPLADOR EN LA BASE DE LA ARENA

La generación de machos de arena para aplicaciones de fundición de metales se realiza normalmente soplando una mezcla de arena y aire en una caja que contiene una cavidad con la forma deseada del macho. Generalmente, se proporcionan múltiples salidas de aire en la caja en un esfuerzo por lograr un relleno de arena uniforme en todo el volumen del macho. Estos respiraderos también se usan en muchos casos para permitir que el aire caliente o un gas catalizador se sople a través de la arena para afectar el curado químico o térmico de un agente de unión sobre las partículas de arena.

El modelo de macho de arena es una aplicación del modelo para flujo granular complementado con salidas de aire especialmente definidas. La salida del modelo incluye no solo un historial del patrón de llenado dentro de una caja del macho, sino que también proporciona información sobre las variaciones de densidad que pueden existir dentro del macho terminado.

Los detalles del modelo de flujo básico se pueden encontrar en la descripción del Modelo de medios granulares de alta concentración. Los respiraderos necesarios para el soplado del macho de arena son de dos tipos:

- Ventilaciones regulares que intercambian directamente aire entre bolsas de aire en una matriz
- Aire externo a la matriz, y ventilación que es el resultado de un flujo de aire indirecto desde las bolsas a través de la arena hasta las ventilaciones que han sido cubiertas por la arena. La última ventilación se conoce como "ventilación global".

Los respiraderos regulares son similares a las válvulas, ya que ambos son mecanismos para intercambiar gas entre regiones de gas puro (burbujas) dentro de una red computacional y regiones de presión externas a la red. Un respiradero se caracteriza por una ubicación, área de flujo A, una presión externa  $P_{ext}$  y un coeficiente de pérdida  $V_c$ . Si una región de gas puro abarca una ventilación, ganará o perderá gas dependiendo de la diferencia de presión. El caudal volumétrico a través de un respiradero  $Q_v$  se define como,

$$Q_{\nu} = V_c A \sqrt{\frac{2(p - P_{ext})}{\rho}}$$

Ecuación 1.76

El factor de raíz cuadrada es una aproximación de Bernoulli para la velocidad del flujo que pasa por el respiradero debido a una caída de presión. Las variables p y  $\rho$  son la presión y la densidad del gas adyacente a la ventilación. Por simplicidad esto se reescribe como,

$$Q_{v} = V_{c2}\sqrt{p - P_{ext}}$$
  
Ecuación 1.77

donde el coeficiente de ventilación, el área de flujo de ventilación, el factor de 2 y la densidad del gas  $\rho$  debajo del signo de la raíz, se han combinado en el coeficiente de ventilación  $V_{c2}$ .

Para aplicaciones típicas de soplado con macho de arena, las pantallas de arena se colocan sobre canales de ventilación que tienen aberturas, que son orificios o ranuras con bordes afilados. Una estimación razonable para la pérdida de flujo a través de estas aberturas es 1/2. Así, el coeficiente de ventilación está dado por,

$$V_{c2} = A \sqrt{\frac{1}{2\rho}}$$

Ecuación 1.78

dónde A está el área de flujo abierto real de la ventilación (por ejemplo, la pantalla).

Se puede definir cualquier número de ventilaciones. Si la fracción del fluido de la mezcla en una celda de cuadrícula computacional que contiene una ubicación de ventilación es mayor que 0.5, se supone que la ventilación está bloqueada por el fluido y no se permite que fluya más gas a través de la ventilación.

En el macho de arena, soplar incluso arena compactada, es porosa al flujo de gas. Una representación simple de este flujo de gas que permite que todas las burbujas de aire en una caja se ventilen, ya sea que contengan o no un respiradero, se denomina ventilación global. La ventilación global tiene la misma formulación que una ventilación individual, excepto que la presión externa para la ventilación global  $P_g$  es el promedio de todos los valores  $P_{ext}$  regulares y el coeficiente de ventilación global  $V_g$  es la suma de todos los valores regulares  $V_{c2}$ . Además, el coeficiente de flujo de la ventilación global se multiplica por un factor  $V_g$  que representa la pérdida de flujo promedio a través de la arena, más la reducción en el área de las ventilaciones debido al bloqueo por arena.

Se puede hacer una estimación simple para el multiplicador del coeficiente de ventilación global  $V_g$ . En una ventilación estándar, la velocidad de flujo que pasa a través de la ventilación se estima utilizando una aproximación de Bernoulli junto con un factor de pérdida de flujo. Para la ventilación global, el aire debe fluir a través de la arena porosa antes de escapar a través de las ventilaciones reales. Asumiremos que la permeabilidad de la arena está dominada por las pérdidas de formas, una suposición que permite una comparación más directa con la expresión de Bernoulli para un respiradero normal. Usando este supuesto, la velocidad del aire que pasa a través de la arena a las rejillas de ventilación puede ser estimada por la expresión,

$$|u| = \left(\frac{d\left(1 - f_{s}^{pk}\right)^{2}}{6f_{s}^{pk}L}\right)^{1/2} \sqrt{\frac{2(p - P_{g})}{\rho}}$$

Ecuación 1.79

En esta expresión p es la presión del aire en la matriz,  $P_g$  es la presión externa,  $\rho$  es la densidad del aire, d es el diámetro de los granos de arena, L es la distancia promedio entre la bolsa de aire y las rejillas de ventilación y  $f_s^{pk}$  es la fracción de volumen de arena completamente compactada. Los factores que involucran la fracción sólida compactada explican la porosidad en la arena. El volumen de aire ventilado a través de este venteo global por unidad de tiempo Q es el producto del número de respiraderos normales  $N_v$ , multiplicado por el área de venteo  $A_v$ , reducido por el bloqueo de arena y multiplicado por la velocidad anterior.  $Q = N_{\nu}A_{\nu}(1 - f_s^{pk})|u|$ 

Ecuación 1.80

Comparando esta tasa con una tasa de ventilación normal, las Ecuación 1.77 y Ecuación 1.78, proporciona el coeficiente de pérdida adicional efectivo asociado con el flujo a través de la arena que debe multiplicar la suma de los coeficientes de pérdida de ventilación normales

$$V_g = \left(\frac{2(1-f_s^{pk})^4}{3f_s^{pk}}\right)^{1/2} \left(\frac{d}{L}\right)^{1/2}$$

Ecuación 1.81

Para una fracción máxima de relleno de arena  $f_s^{pk} = 0.63$ , se obtiene un diámetro nominal de grano de 0.02 cm y una estimación de L = 1.0 cm. Este valor se ha encontrado computacionalmente para dar resultados razonables.

## Movimiento de partículas y flujo por campo eléctrico

Una carga eléctrica o dipolos de carga pueden ser transportados por moléculas, pequeñas gotas y partículas llamadas carga, o cargar dipolos portadores, o partículas de masa en FLOW-3D. Si la carga de una partícula i es  $e_i$ , la fuerza eléctrica que actúa sobre esta partícula es

$$f_i = e_i E$$
  
Ecuación 1.82

dónde está la intensidad del campo eléctrico E y su cálculo se describio anteriormente. Si una partícula de masa *i* transporta dipolos de carga y el momento del dipolo correspondiente es  $p_i$ , la fuerza eléctrica (llamada fuerza de polarización) impuesta sobre esta partícula de masa es

$$f_i = (p_i \nabla) E$$
  
Ecuación 1.83

Si todas las pérdidas de energía en los desplazamientos se desprecian, el momento dipolar se calcula por

$$p_i = 4\pi\varepsilon_0 r_p^3 K_f \left(\frac{K_p - K_f}{K_p + 2K_f}\right) E$$

Ecuación 1.84

donde  $K_p$  es la constante dieléctrica de la partícula,  $K_f$  es la constante dieléctrica del fluido,  $r_p$  es el radio de la partícula y  $e_0$  es la permitividad del vacío. Luego, la fuerza eléctrica impuesta sobre la partícula de masa *i*, que lleva los dipolos de carga, se puede lanzar en

$$f_i = 2\pi\varepsilon_0 r_p^3 K_f \left(\frac{K_p - K_f}{K_p + 2K_f}\right) \nabla E^2$$

Ecuación 1.85

En lugar de prestar atención a los desplazamientos mencionados anteriormente, consideramos fluido donde se distribuyen estos cargos o cargadores de dipolos. Según la ley de Newton, el fluido experimentará algunas fuerzas del cuerpo debido a la existencia de dipolos de carga o carga. La fuerza del cuerpo debido a la carga libre es

$$F = -\rho_e E$$
*Ecuación 1.86*

Dónde  $\rho_0$  es la densidad de carga libre. La fuerza corporal debida a los dipolos de carga es

$$F = (P\nabla)E$$

Ecuación 1.87

Donde P es la densidad del momento dipolar. Para dipolos diluidos en fluido, esta densidad se puede calcular por

$$P = \varepsilon_0 (K_f - 1)E$$
  
Ecuación 1.88

La fuerza del cuerpo se calcula entonces por

$$F = \frac{1}{2}\varepsilon_0 \big(K_f - 1\big)\nabla E^2$$

Ecuación 1.89

En FLOW-3D, los usuarios pueden proporcionar una distribución de densidad de carga. Esta densidad de carga distribuida se define utilizando la variable escalar FLOW-3D que tiene índex *IECHRG* (un parámetro de entrada FLOW-3D).

El movimiento de las partículas que llevan dipolos de carga inducidos debido a la polarización se denomina dielectroforesis de partículas (DEP), mientras que el flujo de líquido debido a la existencia de dipolos de carga a partir de la polarización se denomina dielectroforesis líquida.

#### Electro-osmosis

En general, la mayoría de las sustancias, como la sílice y el vidrio, adquirirán una carga eléctrica superficial cuando se pongan en contacto con un medio acuoso (polar) (solución de electrolito), como se muestra en la siguiente figura.



Figura 1.1 Generacion de carga entre la arena de moldeo y el metal

Una capa llamada capa doble eléctrica (EDL) se forma cerca de la superficie cargada en la que hay un exceso de contraiones sobre los iones para neutralizar la carga de la superficie. Hay más contraiones que iones en la región cercana al interfaz fluido / sólido. El potencial eléctrico creado debido a la EDL se denomina potencial  $\xi$  – y se supone que se impone en la superficie sólida. El potencial  $\xi$  – es una propiedad del par sólido-líquido y puede medirse experimentalmente. El grosor de la EDL se indica mediante el siguiente parámetro, denominado distancia de protección de Debye o longitud de Debye.

$$\lambda_D = \left(\frac{\varepsilon RT}{2F^2 z^2 c_0}\right)^{1/2}$$

Ecuación 1.90

Donde:

- $\varepsilon$  = permisividad del líquido
- R = constante de gas
- T =temperatura
- F = constante de Faraday
- $c_0 =$  concentración de iones
- z = valencia

Se pueden encontrar más detalles sobre la EDL y la física relacionada en [Probstein-1994]. El flujo electro osmótico o electroósmosis se refiere al movimiento del fluido que se produce cuando se aplica un campo eléctrico a una solución de electrolito cerca de una superficie cargada. El proceso puede ser descrito por las siguientes ecuaciones.

$$F = \rho_E E$$

$$Ecuación 1.91$$

$$\rho_E = -2Fc_0 sinh\left(\frac{F\psi}{RT}\right)$$

$$Ecuación 1.92$$

$$\nabla^2 \psi = rac{
ho E}{arepsilon}$$

Ecuación 1.93

Donde  $\psi$  es el potencial  $\xi$  –. Se impone una condición de límite similar a un aislamiento para el potencial en todos los límites de malla con una condición de simetría. Sobre superficies sólidas (obstáculos), se impone el potencial  $\xi$  – . Aquí se asume la distribución de densidad de carga de Boltzmann para líquido con valencia única. Pero el usuario puede proporcionar fácilmente otras distribuciones de densidad de carga diferentes en dos funciones simples llamadas *psi* y *df dp f i* lanzadas a los usuarios.

# k. MODELO DE ESTRÉS ELÁSTICO Y TERMOELÁSTICO

El modelo de tensión elástica en FLOW-3D se implementa con el tensor de tensión elástico separado en dos partes, el desviador y el isotrópico. La parte isotrópica es la tensión asociada con la expansión o contracción uniforme del material. Puede pensarse como una presión. A la inversa, la parte desviadora es el estrés asociado con el cizallamiento y el estiramiento del material. La parte isotrópica del estrés se resuelve de manera muy similar a la presión para materiales incompresibles. Se resuelve implícitamente para todos en los casos evitar los pequeños pasos de tiempo asociados con el alto módulo de volumen de la mayoría de los materiales. La parte desviadora del estrés se resuelve por separado, ya sea de forma implícita o explícita.

### Modelo de Formulación

El modelo de tensión elástica incremental incorporado en FLOW-3D calcula la tensión elástica utilizando la teoría de Hookean lineal. Aunque esta ecuación constitutiva predice respuestas lineales al estrés, la implementación como un modelo incremental permite la predicción de respuestas altamente no lineales porque la respuesta dentro de cada diferencial de tiempo puede ser bien aproximada como lineal. La siguiente figura muestra visualmente cómo la tensión total es una suma de la tensión viscosa y la tensión elástica.

Así, el modelo predice que el estado total de tensión es una suma de la tensión viscosa y la tensión elástica. Uno de los dos domina, dependiendo de la tensión local y la tasa de tensión. Supongamos que una varilla de material viscoplástico, como se describe en este modelo, sufre una cantidad fija de tensión, impuesta durante un tiempo muy corto. Este modelo predeciría un aumento correspondiente en la tensión elástica, que es linealmente proporcional a la tensión.



Figura 1.2 Vista del modelo viscoplastico mostrando la relación entre esfuerzos elásticos y viscosos

Además, durante el corto tiempo de imposición de la tensión, la tensión viscosa se volvería significativa, solo para caer a cero en el instante en que cesara la imposición de la tensión. Si se impusiera una tensión adicional hasta un punto tal que la tensión elástica supera la tensión de rendimiento, el material cedería y comenzaría a fluir como un líquido con viscosidad η.

Para pequeñas deformaciones (por ejemplo, el supuesto de Hookean), el estado de tensión  $\tau_E$  para un sólido elástico (en tres dimensiones) que experimenta expansión térmica es

$$\tau_E = \left(K - \frac{2}{3}G\right)eI + 2GE - 3\alpha K(T - T_0)I$$

Ecuación 1.94

donde:

- *E* es el tensor de tensión,
- *I* es el tensor isotrópico unitario,
- *G* es el módulo de corte,
- *K* es el módulo de volumen,
- $\alpha$  es el coeficiente de expansión térmica lineal
- *T* es la temperatura local
- $T_0$  es la temperatura de referencia.
- e es la tensión de volumen; esto caracteriza la expansión o contracción isotrópica del material y es igual a la traza de tensión

## Ecuación 1.95

Aunque la Ecuación 1.95 es un modelo lineal, si se calcula de manera incremental en períodos de tiempo lo suficientemente pequeños como para que cada deformación incremental sea lo suficientemente pequeña como para obedecer las suposiciones lineales, se pueden predecir procesos no lineales. En la Ecuación 1.95 se puede escribir tanto para las partes desviadas como para las isotrópicas  $\tau_E$  (por definición,  $\tau_E$  es simétrica). La parte desviadora es

$$\tau_E = 2GE$$

Ecuación 1.96

Dónde E es la parte desviadora de  $\tau E$  y E es la parte desviadora de E. En tres dimensiones es

$$E' = E - \frac{1}{3}eI$$

Ecuación 1.97

La parte isotrópica de la Ecuación 1.94 es

$$p = -Ke + 3\alpha K(T - T_n)$$

Ecuación 1.98

donde p es el negativo de la tensión isotrópica media, o "presión", y es igual a  $-tr(\tau_E)/3$ 

Para el modelo de estrés incremental, la Ecuación 1.96 y Ecuación 1.98 deben estar relacionados con las cantidades existentes en FLOW-3D. En términos del tensor de velocidad de deformación, la Ecuación 1.96 se puede escribir como una ecuación diferencial

$$\frac{\delta \tau_E}{\partial t} + \nabla (u\tau_E) = 2GE'(x,t') + \tau_E W + W^T \tau_E$$
Ecuación 1.99

- $\frac{\delta \tau_E}{2 \star}$  Cambio de tensiones en un punto del espacio.
- $\nabla(u\tau_E)$  Cambio de tensiones debido al movimiento del cuerpo
- 2GE'(x,t') Cambio de las tensiones debido a los esfuerzos cortantes
- $\tau_E W + W^T \tau_E$  Cambio de las tensiones debido a la totacion del cuerpo

Dónde  $\dot{E}$  es la parte incremental del tensor de velocidad de deformación. En tres dimensiones, es

$$\dot{E}' = \frac{1}{2} \left[ \nabla u + (\nabla u)^T \right] - \frac{1}{3} \dot{e}I$$

Ecuación 1.100

donde  $\dot{e}$  es la tasa de deformación de volumen, igual a  $\nabla u$ . La Ecuación 1.99 se resuelve en FLOW-3D utilizando matrices escalares para almacenar los componentes del tensor de tensión elástico; estos componentes ya están advertidos con el movimiento del material, y la tensión incremental se agrega a los componentes del tensor de tensión en cada diferencial de tiempo. Del mismo modo, la Ecuación 1.98 se puede reescribir como

$$\frac{\partial p}{\partial t} + \nabla(up) = -K\dot{e} + 3\alpha K \left[\frac{\partial T}{\partial t} + \nabla(uT)\right]$$
  
Ecuación 1.101

El término advección en la Ecuación 1.101 (el segundo término en el lado izquierdo) se supone que es pequeño, en relación con el tiempo derivado de p porque las

ondas de presión, especialmente dentro de los sólidos, se mueven mucho más rápido que el material transportado (en todas las simulaciones subsónicas). Por lo tanto, se supone que este término es cero.

El valor actual de la tensión es una función de la historia pasada de un elemento material. El material que ingresa al dominio tiene un estado nulo de tensión, a menos que se especifique lo contrario en los límites del dominio. Además, la condición inicial al comienzo de la simulación tiene un estado nulo de tensión, a menos que las condiciones iniciales especifiquen lo contrario.

Para predecir los efectos de rendimiento, se utiliza la condición de rendimiento de Mises. Esta condición es

$$II_{\tau_E} = \frac{Y^2}{3}$$
Ecuación 1.102

donde  $II_{\tau'_E}$  es la segunda invariante de la parte desviadora del tensor de tensión elástica y Y es el límite de tensión de rendimiento, un parámetro definido por el usuario. En las regiones del material donde la tensión elástica (medida por  $II_{\tau'_E}$ ) excede el criterio de rendimiento, la tensión elástica se relaja de tal manera que la condición en la Ecuación 1.102 se cumple:

$$\tau_E^{'*} = \sqrt{\frac{2Y^2}{3II_{\tau_E}}} \tau_E^{'}$$

Ecuación 1.103

Donde  $\tau_E^{'*}$  es el tensor de tensión elástico limitado al rendimiento.

La Ecuación 1.99 puede resolverse implícita o explícitamente y la Ecuación 1.101 se resuelve implícitamente para p en cada instante. Los valores resultantes se incluyen en la ecuación de momento:

$$\frac{\partial u}{\partial t} + \nabla (uu) = \frac{1}{\rho} \left[ -\nabla P + \nabla (\tau v + \tau_E^*) + F_b \right]$$

Ecuación 1.104

- $\tau v$  tensión viscosa
- $\tau_E^*$  es el límite elástico

# Metodo resolutivo

La solución del tensor de velocidad de deformación  $\dot{E}$  es similar a la utilizada en el algoritmo de tensión viscosa. Los componentes normales de  $\dot{E}$  se calculan en el centro de la celda, mientras que los componentes de corte se calculan en los bordes de la celda. La siguiente figura muestra una celda computacional típica y las ubicaciones de cálculo del

componente de tensión. Las componentes de cortantes se calculan en los bordes de la celda para mayor comodidad computacional y estabilidad numérica.



Figura 1.3 Celda computacional que muestra las ubicaciones de los componentes del tensor de velocidad de deformación

En superficies libres, se presume que el fluido externo es un vapor de gas que ejerce una presión despreciable en la superficie del fluido. Por lo tanto,  $n \tau_E = 0$  en tales interfaces. En FLOW-3D, se conocen las direcciones principales en las que se conocen las superficies libres y el estado de las celdas vecinas. A partir de esta información, los componentes adecuados  $\tau_E$  se establecen en cero en la superficie libre para garantizar que se cumple la condición mencionada anteriormente. En las interfaces con paredes sólidas u obstáculos, la velocidad del fluido en la celda adyacente a la pared (u obstáculo) y la velocidad de la pared (u obstáculo) se utilizan para calcular la tasa de tensión utilizando la Ecuación 1.100.

Si se elige el método explícito, la tensión elástica se actualiza con la Ecuación 1.99 durante  $\Delta t - 1$ , y el valor resultante de  $\tau_E^{**}$  se utiliza en la Ecuación 1.104 para calcular la nueva velocidad para  $\Delta t$ .

Este método tiene la ventaja de la simplicidad y el cálculo rápido durante cada  $\Delta t$ . Sin embargo, para materiales cuyos efectos elásticos dominan otros efectos, el límite de estabilidad numérica puede ser muy pequeño. Por lo tanto, el método implícito se puede seleccionar para eliminar este límite de tiempo para tales problemas. Las desventajas de este método son que el esfuerzo computacional requerido durante cada  $\Delta t$  es mucho mayor y puede amortiguar las oscilaciones que pueden ocurrir físicamente.

Si se elige el algoritmo implícito, una predicción de la velocidad se calcula de la misma manera que el método explícito. Sin embargo, la velocidad se actualiza basándose en el resto de la ecuación de momento, junto con la ecuación de la tensión isotrópica Ecuación 1.101.

$$\delta u = \frac{\Delta t}{\rho} \left[ -\nabla(\delta P) + \nabla(\delta \tau_E^{*}) \right]$$

Ecuación 1.105

donde el valor de  $\tau_E^{*}$  es el valor más actualizado.

El método utilizado para resolver la Ecuación 1.105 es el método de Jacobi. En este método, todos los componentes del tensor de tensión elástica actualizados en todo el dominio se resuelven en función de la velocidad calculada a partir de la iteración anterior, los componentes de las celdas recientemente calculadas no se incluyen hasta la siguiente iteración. Esto se repite hasta que el cambio de velocidad de una iteración a la siguiente sea más pequeño que una tolerancia preestablecida. Si lo desea, este método se puede utilizar junto con el método de esfuerzo viscoso implícito de Jacobi para materiales cuyos efectos viscosos también son muy grandes. Actualmente, el modelo de esfuerzo elástico implícito no se puede usar con los algoritmos de esfuerzo viscoso implícito de ADI o GMRES.

El negativo de la tensión elástica isotrópica media (es decir, la presión), *p* se calcula por separado, utilizando la Ecuación 1.105, y el algoritmo de solución es exactamente el mismo que el de la presión del líquido. Los componentes de presión y velocidad se actualizan para cada iteración hasta el residual de la Ecuación 1.105 cae por debajo de una tolerancia preestablecida. El método numérico puede ser SOR, ADI o GMRES. El algoritmo SOR es muy similar al método de Jacobi mencionado anteriormente, excepto que se utilizan los valores más actualizados, incluidos los valores de los vecinos calculados en la iteración actual. El algoritmo ADI resuelve simultáneamente una fila completa de celdas en la dirección elegida, mientras que el algoritmo GMRES resuelve el sistema de ecuaciones completamente acoplado.

#### o Cálculo del módulo elástico, G

El módulo de elasticidad G puede ser uniforme o variar espacialmente en función de la fracción del fluido (para un modelo de dos fluidos) o de la temperatura (para un modelo con transporte de energía). Se define como

$$G(F,T,\rho,scl) = G_1 f + G_2(1-f) - (G_{T1}f + G_{T2}(1-f))(T-T^*)$$
  
Ecuación 1.106

dónde:

- $G_1 ext{ y } G_2 ext{ son los módulos elásticos a la temperatura de referencia para los materiales 1 y 2 (denominados fluidos 1 y 2 en la GUI, pero no son necesariamente fluidos en este caso), respectivamente$
- $G_{T1}$  y  $G_{T2}$  son la sensibilidad lineal a la temperatura para los materiales 1 y 2, respectivamente.

Al menos uno de estos valores debe configurarse, de lo contrario se asumirá que G es cero en todas partes. Tenga en cuenta que, en la situación normal, en la que el módulo elástico cae al aumentar la temperatura, los valores de  $G_{T1}$  y  $G_{T2}$  son positivos. Además, G puede ser una función de la concentración escalar (cuando se usan cantidades escalares) y la densidad (cuando se activa el modelo de densidad variable).

#### o Cálculo del límite de tensión de rendimiento, Y

Al igual que el módulo elástico, el límite de la tensión de rendimiento puede ser uniforme, o variar espacialmente en función de la fracción del fluido (para un modelo de dos fluidos) o la temperatura (para un modelo con transporte de energía), se define como

$$Y(F, T, \rho, scl) = Y_1 f + Y_2 (1 - f) - (Y_{T1} f + Y_{T2} (1 - f))(T - T^*)$$

Ecuación 1.107

dónde:

- $Y_1$  y  $Y_2$  son los límites de tensión de rendimiento a la temperatura de referencia para los materiales 1 y 2, respectivamente.
- $Y_{T1}$  y  $Y_{T2}$  son la sensibilidad lineal a la temperatura para los materiales 1 y 2, respectivamente.

Al menos uno de estos valores debe configurarse, de lo contrario se asumirá que Y es cero en todas partes. Tenga en cuenta que, en la situación normal, en la que el límite de la tensión de rendimiento disminuye con el aumento de la temperatura, los valores de  $Y_{T1}$  y  $Y_{T2}$  son positivos. Además, Y puede ser una función de la concentración escalar (cuando se usan cantidades escalares) y la densidad (cuando se activa el modelo de densidad variable).

# I. MEMBRANA ELÁSTICA Y MODELO DE PARED ELÁSTICA

Está disponible en FLOW-3D una capacidad limitada de interacción de estructura de fluido (FSI), con el modelo de membrana y pared elástica. En este modelo, la deformación de una membrana elástica o una pared elástica impacta contra el flujo de fluido adyacente, mientras que la presión del fluido, a su vez, le afecta la deformación. Estas interacciones se describen en el código de forma totalmente acoplada.

La principal limitación del modelo es que se supone que la deformación es pequeña, es decir, para cada membrana y pared elástica, su deflexión es mucho más pequeña que su tamaño. Esto permite simplificaciones útiles para el modelo. Por lo tanto, se supone que las geometrías de las membranas y las paredes elásticas son invariantes en el tiempo en todo el cálculo, mientras que los efectos de su deformación en el flujo del fluido se describen con la fuente de volumen o el sumidero distribuidos en la interfaz de la estructura del fluido. Con la suposición adicional de que la fuerza de presión se distribuye uniformemente en la superficie de la membrana, se utilizan soluciones analíticas en lugar de algoritmos de análisis estructural para determinar la deformación de la membrana para una mejor eficiencia computacional.

#### Membrana elástica

Una membrana elástica en FLOW-3D es una placa delgada rectangular o circular que sufre una pequeña deformación elástica bajo la acción de fuerzas externas. Su espesor y propiedades materiales se asumen uniformes. Su borde puede ser simplemente apoyado o sujetado. Por borde apoyado simplemente nos referimos a un borde con desviación cero y momento de fuerza neta cero. Sin embargo, en un borde sujeto, tanto la desviación como las derivadas de primer orden son cero, pero el momento de fuerza generalmente es distinto de cero. En cualquier caso, el modelo requiere que una membrana tenga la misma condición a lo largo de sus bordes. No hay restricción en la ubicación de una membrana en la rejilla, pero la superficie de la membrana debe ser perpendicular a los ejes x, y o z.

El modelo considera dos fuerzas externas que actúan sobre la membrana: la fuerza de presión hidráulica y una fuerza del actuador. La fuerza de presión hidráulica se obtiene mediante la integración de la presión en ambos lados de la membrana. Luego se convierte en una fuerza distribuida uniformemente sobre toda la membrana.

La fuerza del actuador está presente en muchas aplicaciones, como el flujo de micro-bomba y la formación de gotas de inyección de tinta. Un ejemplo es sobre un actuador piezoeléctrico conectado a una membrana. Cuando se aplica un voltaje eléctrico, el actuador piezoeléctrico ejerce una fuerza sobre la membrana en la dirección normal de la superficie, que es la llamada fuerza del actuador. Los usuarios pueden prescribir la fuerza del actuador como una función de tiempo sinusoidal o lineal por partes. En el modelo, siempre se asume que el actuador está centrado en un lado de la membrana, y la forma (pero no necesariamente el tamaño) del área de contacto del actuador com la membrana es la misma que la de la membrana. En otras palabras, tanto la membrana como el actuador deben ser rectangulares o circulares y deben tener el mismo eje simétrico. Debido a que el propio actuador generalmente tiene una rigidez mucho menor que la membrana, se supone además que la fuerza del actuador siempre actúa uniformemente sobre el área de contacto. Si se da un área de contacto cero, entonces la fuerza del actuador se trata como una fuerza concentrada en el centro de la membrana.

Para lograr una mejor eficiencia computacional, se utilizan soluciones analíticas en lugar de algoritmos de análisis estructural para el cálculo de la desviación. En cualquier momento, se supone que la membrana se encuentra en un estado de equilibrio, definido por el equilibrio de la fuerza hidráulica, la fuerza del actuador y la rigidez de la membrana. Las soluciones analíticas se obtienen resolviendo la ecuación de equilibrio para una placa delgada con pequeña deformación,

$$\nabla^2 \nabla^2 w = \frac{f}{D}$$

Ecuación 1.108

donde

- w es la deflexión
- *f* es la fuerza externa neta por unidad de área en la membrana,
- *D* es la rigidez a la flexión,
$$D = \frac{Eh^3}{12(1-v^2)}$$

Ecuación 1.109

donde

• *E* es el módulo de Young,

- *v* es la relación de Poisson
- *h* es el grosor de la membrana.

Considere una membrana rectangular con su superficie perpendicular al eje z. En un sistema de coordenadas cartesiano Ecuación 1.108 se escribe entonces como

$$\frac{\partial^4 w}{\partial x^4} + 2 \frac{\partial^4 w}{\partial x^2 \partial y^2} + \frac{\partial^4 w}{\partial y^4} = \frac{f}{D}$$
  
Ecuación 1.110

Para mayor comodidad, colocamos el origen de las coordenadas en el centro de la membrana. Supongamos  $a \ y \ b$  representan las longitudes de la membrana en las direcciones  $x \ e \ y$ , respectivamente. Las condiciones de contorno para la membrana con los bordes simplemente apoyados son

$$w = 0 \quad y \quad \frac{\partial^2 w}{\partial x^2} = 0 \quad \text{para} \quad x = \mp \frac{a}{2}$$
$$w = 0 \quad y \quad \frac{\partial^2 w}{\partial y^2} = 0 \quad para \quad y = \mp \frac{b}{2}$$
Ecuación 1.111

Si la membrana tiene bordes retenidos, las condiciones de contorno son

$$w = 0 \quad y \quad \frac{\partial w}{\partial x} = 0 \quad para \ x = \pm \frac{a}{2}$$
$$w = 0 \quad y \quad \frac{\partial w}{\partial y} = 0 \quad para \ y = \pm \frac{b}{2}$$

Ecuación 1.112

Para una membrana circular, es conveniente escribir la Ecuación 1.108 en un sistema de coordenadas cilíndricas con su origen ubicado en el centro de la membrana,

$$\frac{1}{r}\frac{d}{dr}\left\{r\frac{d}{dr}\left[\frac{1}{r}\frac{d}{dr}\left(r\frac{dw}{dr}\right)\right]\right\} = \frac{f}{D}$$
*Ecuación 1.113*

*a* es el radio de la membrana, la condición de contorno para el borde simplemente apoyado es

$$w = 0$$
  $y$   $\frac{\partial^2 w}{\partial r^2} = 0$  para  $r = a$ 

Ecuación 1.114

Para el borde sujetado, la condición de contorno es

$$w = 0$$
  $y$   $\frac{\partial w}{\partial r} = 0$  para  $r = a$   
Ecuación 1.115

Todas las soluciones analíticas para la desviación de la membrana utilizadas en el modelo satisfacen las ecuaciones anteriores. Algunas de estas soluciones se encuentran en Timoshenko (1959), mientras que otras se derivan de las soluciones de Timoshenko utilizando el método de suposición.

Para tener en cuenta los efectos del movimiento de la membrana en el flujo de fluido, la ecuación de continuidad se modifica con un término de fuente de volumen (o sumidero) agregado a su lado derecho,

$$\frac{V_f}{\rho}\frac{\partial\rho}{\partial t} + \frac{1}{\rho}\nabla(\rho\vec{u}A) = S$$

Ecuación 1.116

En un volumen de control de cómputo, o celda de malla,

$$S = \frac{S_{mb}}{V_{cell}} \vec{V}_{mb} \vec{n}$$

Ecuación 1.117

donde  $V_{cell}$  es el volumen de la celda,  $S_{mb}$ ,  $\vec{n} ext{ y } \vec{V}_{mb}$  son respectivamente el área de la superficie, el vector normal exterior y la velocidad de la superficie de la membrana en la celda de malla.  $\vec{V}_{mb}$  se obtiene a partir de la tasa de cambio de desviación. La ecuación de transporte para la función VOF también se modifica con un término fuente *FS*,

$$V_f \frac{\partial F}{\partial t} + \nabla \left( F \vec{u} A_f \right) = FS$$

Ecuación 1.118

Otras ecuaciones de transporte para el impulso, la energía, la turbulencia y los escalares permanecen sin cambios porque en FLOW-3D estas ecuaciones se utilizan en sus formas no conservativas. Cuando se derivan de sus formas de conservación teniendo en cuenta la ecuación de continuidad, los términos de origen debidos al movimiento de la membrana se cancelan.

## Pared elastica

Una pared elástica en FLOW-3D es un objeto elástico de forma arbitraria, y su deformación superficial es pequeña y proporcional a la presión hidráulica,

$$w = -\frac{(p - p_{ref})}{K}$$

Ecuación 1.119

donde

- w es la deflexión local en la dirección normal de la superficie
- p es la presión local,
- $p_{ref}$  es una presión de referencia,
- *K* es el coeficiente de rigidez por unidad de área.

Este tipo de deformación elástica se produce si la relación de Poisson para el material de la pared es cero, lo que significa que la tensión normal no causa tensión lateral. Es una buena aproximación para la deformación de la pared elástica si la relación de Poisson no es cero sino pequeña. Con el término de tensión lateral desatendido, la ley de Hooke se reduce a

$$\varepsilon = \frac{\sigma}{E}$$

Ecuación 1.120

donde

- $\varepsilon$  es la tensión
- $\sigma$  es el estrés normal
- *E* es el módulo de Young

K en la Ecuación 1.119 es un parámetro prescrito por el usuario. Para determinar el valor K, consideremos una placa en equilibrio con un lado fijo y el otro lado con una fuerza normal. Supongamos que la relación de Poisson es despreciable y que la tensión normal  $\sigma$  se encuentra en un lugar en su superficie. Desde el balance de fuerza, la tensión normal  $\sigma$  dentro de la placa tiene el mismo valor a lo largo de la línea vertical a través de esa ubicación. Indicamos el grosor de la placa como h y la desviación como w. La tensión es entonces w/h, y la ley de Hooke en la Ecuación 1.120 da

$$w = \frac{\sigma}{E_{/h}}$$

Ecuación 1.121

Indica que en este caso  $K = \frac{E}{h}$ . En general, K se puede estimar como

$$K = \frac{E}{L}$$

Ecuación 1.122

donde L es una escala de longitud comparable a la profundidad de la pared elástica. También se puede obtener por otros medios, como la medición experimental o el análisis estructural completo.

Los efectos del movimiento de la pared elástica sobre el flujo de fluido se describen agregando una fuente de volumen (o sumidero) en la superficie de la pared. La continuidad y las ecuaciones de transporte para VOF se modifican de la misma manera que se describe en la sección para membranas elásticas.

#### Modelo de limitaciones

El modelo permite múltiples objetos de membrana elástica y paredes elásticas con diferentes formas, tamaños, orientaciones y cantidades físicas. Es compatible con la mayoría de los otros modelos de FLOW-3D. Por ejemplo, puede incluirse la transferencia de calor a través de membranas y paredes elásticas. Sin embargo, existen restricciones y limitaciones.

El modelo requiere que tanto las membranas elásticas como las paredes elásticas tengan pequeñas desviaciones. Una pequeña desviación para una membrana significa que la deflexión es menor que el tamaño de la membrana. Para una pared elástica, su deformación debe ser pequeña en comparación con el tamaño de celda computacional. Esta suposición nos permite ignorar el cambio real en la posición de las superficies deformantes. En otras palabras, la forma de las membranas y las paredes deformantes se fijan a lo largo de los cálculos, como se define en su configuración inicial. Como se muestra arriba, los efectos de la deformación de la superficie en el movimiento del fluido se modelan a través de la distribución de la fuente de fluido en la superficie de deformación. Cuando se muestran los resultados computacionales, la deformación se puede visualizar trazando los contornos de la desviación. También se observa que una membrana / pared elástica no puede ser porosa o un objeto en movimiento al mismo tiempo. Si un objeto en movimiento choca con una membrana o una pared elástica, este último se trata como un objeto rígido que no se mueve en la simulación de colisión, por lo que el impacto solo afectará al movimiento del objeto en movimiento.

#### m. MODELO DE VENTILADOR E IMPULSOR

El modelo de ventilador e impulsor utilizado en FLOW-3D se puede usar cuando la velocidad de rotación de las cuchillas es tal que se requieren muchas revoluciones antes de que se establezca un flujo constante en el fluido.

Este modelo induce componentes de velocidad tanto de remolino como axial. La definición de un ventilador o impulsor se realiza en términos de un obstáculo "fantasma" que define una región, pero no tiene ningún efecto de bloqueo de obstáculo real. En general, se supone que estos obstáculos son cilindros circulares rectos de radio exterior R, radio interior r y grosor L, que definen la región barrida por las cuchillas giratorias.

Aparte de la geometría, los parámetros restantes que determinan el rendimiento de un ventilador o impulsor son su tasa de rotación  $S_d$ , un coeficiente de acomodación  $A_d$  que controla la efectividad de las palas para poner el fluido en movimiento y un coeficiente  $B_d$  que controla la cantidad de flujo axial inducido.

Es mejor determinar los valores de  $A_d$  y  $B_d$  a partir de datos empíricos, ya que el rendimiento de un ventilador o impulsor depende de los detalles de los tamaños y formas de las aspas y del número de aspas. Los fabricantes de estos dispositivos a menudo los caracterizan por las llamadas "curvas de rendimiento", que son gráficos de caída de

presión en el dispositivo en comparación con el caudal promedio que pasa a través de él. La siguiente figura muestra un ejemplo típico (compuesto) de una curva de rendimiento.



Figura 1.4 Curva de rendimiento tipica (linea continua) y aproximacion de FLOW-3D

Se puede derivar una curva de rendimiento para el modelo utilizado en FLOW-3D al relacionar la fuente de momento de rotación con una caída de presión equivalente en todo el grosor del dispositivo y promediando el caudal en toda la sección transversal. El resultado es:

$$\Delta p = \rho L A_d \left(\frac{2}{3} S_d B_d R \left(1 - \frac{r^3}{R^3}\right) - \frac{Q}{\pi R^2}\right)$$
  
Ecuación 1.123

En esta expresión  $\rho$  es la densidad del fluido y Q es el caudal neto. Esta relación proporciona una curva de rendimiento lineal con intercepción  $\Delta \rho_0$  en y, la intersección  $Q_0$  en x en la figura anterior dada por:

$$\Delta p_0 = \rho L\left(\frac{Q_0}{\pi R^2}\right) A_d , \qquad Q_0 = \frac{2}{3}\pi (R^3 - r^3) S_d B_d$$
Ecuación 1.124

Usando estas relaciones y una tasa de rotación dada,  $OSPIN = S_d$ , los parámetros  $OADRG = A_d$  y  $OBDRG=B_d$  se pueden calcular para dar una aproximación lineal a cualquier curva de rendimiento deseada.

## n. MODELOS DE INTERACCIÓN DE ESTRUCTURA DE FLUIDOS (FSI) Y EVOLUCIÓN DEL ESTRÉS TÉRMICO (TSE)

Los modelos de interacción de estructura de fluidos (FSI) y la evolución de la tensión térmica (TSE) se basan en el mismo enfoque: resolución de la dinámica de sólidos y el flujo de fluidos completamente acoplados dentro de FLOW-3D.

El enfoque utilizado para este modelo es diferente a cualquier otro módulo en FLOW-3D. La malla original estructurada de diferencias finitas utilizada para los cálculos de transferencia de fluidos y calor no se utiliza con el nuevo módulo. En su lugar, se utiliza una rejilla de elementos finitos (FE) no estructurada y conforme que se deforma junto con el sólido. Esto se debe a que resolver las ecuaciones de mecánica sólida es mucho más conveniente y preciso con una malla FE conforme que con una malla de diferencias finitas no conforme.

La malla estándar FLOW-3D se utiliza para generar la nueva malla de elementos finitos (FE) para componentes sólidos (para FSI) o regiones de fluidos solidificados (para TSE). En la mayor parte de las regiones sólidas, la malla hexaédrica estándar se utiliza sin alteración. En la interfaz de la región sólida, los puntos de nodo más cercanos se mueven sobre la superficie de la región sólida a lo largo de la normal a la superficie. En algunos casos, los nodos cercanos se eliminan o se fusionan con los vecinos. La siguiente figura muestra un ejemplo bidimensional simplificado de este proceso. Por lo tanto, la creación de la malla FE es completamente automática y no requiere ninguna entrada adicional por parte del usuario. Los elementos alejados de la interfaz siempre tienen 8 nodos. Debido a la fusión de nodos cerca de la interfaz sólida, los elementos en la superficie pueden tener 7, 6, 5 o incluso 4 nodos.



Figura 1.5 Malla bidireccional

## Ecuación de movimiento y estrés

Los modelos FSI y TSE resuelven la ecuación estándar de movimiento en regiones sólidas (fluido solidificado para el modelo TSE y componentes sólidos para el modelo FSI)

$$\rho \frac{d^2 x}{dt^2} = \nabla \sigma + \rho b$$

Ecuación 1.125

donde

- p es la densidad del material
- t es el tiempo
- x es la coordenada de un punto en el material,
- $\sigma$  es el tensor de tensión Cauchy
- *b* es el vector de fuerza corporal

El tensor de tensión Cauchy es una medida del estado de tensión en el material. Está relacionado con la tensión del material, así como con las tensiones internas y térmicas. La tensión es la cantidad de deformación física sufrida por el material y también es un tensor. El enfoque utilizado en este trabajo se basa en pequeñas deformaciones incrementales. Es decir, de  $\Delta t$  tiempo a otro, se calcula el incremento de la tensión:

$$E' = \frac{1}{2} \{ [\nabla(\delta x)]^T + \nabla(\delta x) \} = \frac{1}{2} \left[ \frac{\partial(\delta x)_i}{\partial x_j^n} + \frac{\partial(\delta x)_j}{\partial x_j^n} \right] e_i e_j$$
  
Ecuación 1.126

Aquí E' es el incremento de tensión, los subíndices i y j las direcciones de coordenadas cartesianas (x, y, z), e i se refieren a los vectores normales de la unidad en x, y, z.  $\partial x$  se refiere al vector de desplazamiento, y es igual a:

$$\delta x = x^n + 1 - n^n$$
*Ecuación 1.127*

donde

- $x^n$  es la posición de un punto material en el ciclo de tiempo previamente calculado
- $x^n + 1$  es la posición del mismo punto en el ciclo de tiempo actual.

El tensor de tensión de Cauchy para el nivel de tiempo actual,  $\sigma^n + 1$  se calcula a partir del modelo de Hookean lineal para cada  $\Delta t$ , y es:

$$\sigma^{n+1} = \sigma^n + \left(K - \frac{2}{3}G\right)tr(E') + 2GE'$$

Ecuación 1.128

Los superíndices n y n + 1 y se refieren a los ciclos de tiempo anteriores y actuales. K y G son los módulos de volumen y corte, respectivamente, tr(E') se refieren a la traza del tensor de tensión E' y es la suma de sus componentes diagonales. El módulo de volumen es un parámetro definido por el usuario que describe la resistencia del material a la expansión o contracción isotrópica. El módulo de corte G describe la resistencia del resistencia del material al corte.

Los módulos de volumen y corte, K y G, se pueden obtener al especificar el módulo de Young (E) y la relación de Poisson ( $\nu$ ). El modelo funciona con cualquier combinación de dos de las cuatro propiedades elásticas. Las relaciones son:

$$K = \frac{E}{3(1-2\nu)} , \qquad G = \frac{E}{2(1-\nu)}$$
  
Ecuación 1.129

Tenga en cuenta que cuando la relación de Poisson se acerca 1/2, K se acerca a infinito, lo que significa que el material se aproxima al límite incompresible. Todas estas propiedades se pueden definir como funciones de la temperatura.

El término de aceleración en la Ecuación 1.125 se resuelve a partir de las posiciones de los puntos en diferentes momentos. Por lo tanto,

$$\rho \frac{d^2 x}{dt^2} = \left(\frac{x^{n+1} - 2x^n + x^{n-1}}{\Delta t^{n+1} \Delta t^n}\right)$$

Ecuación 1.130

#### Metodo de elementos finitos (FEM)

La Ecuación 1.125 comprende una ecuación diferencial parcial tridimensional, resuelta durante cada  $\Delta t$ , cuyas incógnitas son  $x^{n+1}$  ( $\sigma^{n+1}$  se calculan directamente desde  $x^{n+1}$  y los valores de nivel de  $\Delta t - 1$ ,  $\sigma$  en la Ecuación 1.126). El método de elementos finitos (FEM) usa el método de los residuos ponderados para resolver la Ecuación 1.125. La forma residual ponderada de la Ecuación 1.125 es:

$$0 = \int_{\Omega} \psi \left[ \nabla \sigma^{n+1} + \rho b - \rho \left( \frac{x^{n+1} - 2x^n + x^{n-1}}{\Delta t^{n+1} \Delta t^n} \right) \right] d\Omega$$
  
Ecuación 1.131

Aquí,  $\psi$  representa la función de ponderación, y  $\Omega$  el dominio. Para mantener el orden de los derivados al mínimo en la formulación, se utiliza la siguiente identidad:

$$\nabla(\psi\sigma^{n+1}) = \psi\nabla\sigma^{n+1} + \nabla\psi\sigma^{n+1}$$
  
Ecuación 1.132

Con la Ecuación 1.132, la Ecuación 1.131 se convierte en:

$$0 = \int_{\Omega} \left[ \nabla \psi \sigma^{n+1} - \psi \rho b + \psi \rho \left( \frac{x^{n+1} - 2x^n + x^{n-1}}{\nabla t^{n+1} \Delta t^n} \right) \right] d\Omega - \int_{\Omega} \nabla (\psi \sigma^{n+1}) d\Omega$$
  
Ecuación 1.133

Del teorema de Green, el último término en el lado derecho de la ecuación se puede convertir en una integral de superficie:

$$0 = \int_{\Omega} \left[ \nabla \psi \sigma^{n+1} - \psi \rho b + \psi \rho \left( \frac{x^{n+1} - 2x^n + x^{n-1}}{\nabla t^{n+1} \Delta t^n} \right) \right] d\Omega - \oint n(\psi \sigma^{n+1}) d\Gamma$$
  
Ecuación 1.134

Aquí *n* está apuntando hacia afuera, normal en la superficie del dominio  $\Omega d\Gamma$  es el área de una porción infinitesimal de la interfaz de la región sólida. Los superíndices n-1,  $n \neq n+1$  se refieren al nivel de tiempo de cada variable. El último término en el lado derecho es distinto de cero solo en la interfaz del dominio. La función de ponderación  $\psi$  consta de una serie de funciones básicas, que se definen como no cero, solo alrededor del punto del nodo al que corresponden y son cero en todos los demás nodos. Por lo tanto,

$$\psi(x) = \sum_{i=1}^{nnodes} \psi_i$$

Ecuación 1.135

donde

- nnodes es el número total de nodos presentes en la malla
- *x* es la posición en coordenadas físicas
- ψ<sub>i</sub> son las funciones de base local definidas en la vecindad del número de nodo *i*. Las funciones básicas son continuas, y su primera derivada existe, pero no es continua Aquí:



Figura 1.6 Volumen de celda

El concepto del elemento ayuda cuando se piensa en las funciones básicas  $\Phi_i$ . Un elemento es un pequeño volumen del dominio cuyos vértices corresponden a los nodos. La figura anterior muestra los 8 nodos dentro de un elemento estándar. Las funciones básicas  $\psi_i$  correspondientes a estos nodos, son todas distintas de cero dentro de este espacio. Las funciones básicas para los nodos que no forman parte del elemento actual son todas cero. Por lo tanto, considerando la Ecuación 1.135, la Ecuación 1.134 se reescribe:

$$0 = \sum_{k=1}^{nnodes} \int_{\Omega} \left[ \nabla \psi_k \sigma^{n+1} - \psi_k \rho b + \psi_k \rho \left( \frac{x^{n+1} - 2x^n + x^{n-1}}{\Delta t^{n+1} \nabla t^n} \right) \right] d\Omega$$
$$- \sum_{k=1}^{nnodes} \oint \psi_k (n \sigma^{n+1}) d\Gamma$$
Ecuación 1.136

Es una serie de términos, de los cuales solo unos pocos son distintos de cero dentro de un elemento en particular. Entonces, la Ecuación 1.136 es ensamblada elemento por elemento. Debido a que  $\psi_k$  en la Ecuación 1.136 son distintos de cero, solo en los elementos compartidos por el nodo k, la Ecuación 1.136 es un conjunto de nnodes ecuaciones, una para cada nodo. Además, debido a que hay tres direcciones cartesianas, hay un total de 3 nnodes ecuaciones escalares.

Las funciones de base individual,  $\psi_k$ , se repiten para cada elemento. Dentro de cada elemento, estas funciones básicas se calculan utilizando las coordenadas

computacionales de cada elemento  $(\xi, \eta, \zeta)$ , independientemente de la orientación del elemento (vea la figura de arriba). Estos son:

$$\psi_{1} = \frac{1}{8}(1-\xi)(1-\eta)(1-\zeta)$$

$$\psi_{2} = \frac{1}{8}\xi(1-\eta)(1-\zeta)$$

$$\psi_{3} = \frac{1}{8}(1-\xi)\eta(1-\zeta)$$

$$\psi_{4} = \frac{1}{8}\xi\eta(1-\zeta)$$

$$\psi_{5} = \frac{1}{8}(1-\xi)(1-\eta)\zeta$$

$$\psi_{6} = \frac{1}{8}\xi(1-\eta)\zeta$$

$$\psi_{7} = \frac{1}{8}(1-\xi)\eta\zeta$$

$$\psi_{8} = \frac{1}{8}\xi\eta\zeta$$

Ecuación 1.137

Aquí el subíndice se refiere al nodo local (es decir, a nivel de elemento). Tenga en cuenta que cada función básica es igual a 1 en su nodo local y 0 en todos los demás nodos. Las funciones básicas se utilizan como función de ponderación para la ecuación residual ponderada, así como para representar la posición y el desplazamiento:

$$x = \sum_{k=1}^{nnodes} x_k \psi_k$$

Ecuación 1.138

donde

- x se refiere a la posición de un punto en el dominio físico
- $x_k$  se refiere al valor de las posiciones almacenadas en cada nodo global
- $\phi_k$  es la función básica en el nodo k.

Tenga en cuenta que aunque la Ecuación 1.138 está escrito en forma general para un punto en cualquier parte del dominio, se puede usar dentro de un elemento individual considerando solo nodos dentro del elemento local. Esto se debe a que los valores  $\phi_k$  de todos los nodos fuera del elemento son cero por definición.

Con la Ecuación 1.138 y Ecuación 1.136 se puede escribir como una serie de 3 **nnodes** ecuaciones escalares con 3 incógnitas: las tres coordenadas de la posición  $x_k$  en cada nodo. La integral se resuelve numéricamente con el método de cuadratura gaussiana y el sistema resultante de ecuaciones lineales se resuelve iterativamente con un solucionador de mínimo residual generalizado (GMRES), similar al utilizado para resolver las ecuaciones de impulso y continuidad acopladas en el fluido.

## Condiciones de frontera en regiones sólidas

Los modelos de interacción de la estructura de fluidos y la evolución del estrés térmico determinan automáticamente las condiciones de contorno en cada cara del elemento del componente sólido.

Donde tales caras entran en contacto con las regiones del fluido, la presión del fluido local determina la tracción  $(n\sigma^{n+1})$  en la Ecuación 1.136. Por lo tanto,

$$n\sigma^{n+1} = -n\rho_{fluid}$$

Ecuación 1.139

El signo negativo está presente porque en la convención de tensiones sólidas, la compresión es negativa.

Cuando las caras del límite son adyacentes al límite del dominio (fluido), el tipo de límite determina la condición para imponer en el sólido. Adyacentes a los límites de las paredes, las regiones sólidas son fijas. Es decir, los nodos están unidos al límite y no pueden moverse. En los límites de simetría, los nodos pueden deslizarse libremente a lo largo del límite, pero no pueden penetrar ni alejarse. En otros límites, la presión en la celda límite adyacente se usa para calcular la tracción, en base a la Ecuación 1.139.

Cuando un componente FSI está en contacto con otro componente (estándar o FSI), siempre se asume que la interfaz es fija. Es decir, los nodos en la interfaz no se mueven durante el curso de la simulación. Por lo tanto, no hay un acoplamiento completo entre dos componentes FSI.

Cuando una región de fluido solidificado está en contacto con otro componente (estándar o FSI), la región de fluido solidificado puede separarse libremente y formar un hueco. Cuando se suministran las propiedades de transporte de calor del gas en el espacio (conductividad y / o emisividad del gas), el coeficiente de transferencia de calor se calcula automáticamente en el espacio (los espacios más amplios reducirán el transporte de calor). Si ocurre la situación opuesta y la región del fluido solidificado se empuja hacia un componente, se aplica una fuerza de restricción a la región para evitar la interferencia en el componente. Alternativamente, si se elige que el componente sea un componente no limitante, entonces solo se aplica una fuerza mínima para mantener la posición de la región solidificada. Esto es útil para simular el desarrollo de estrés térmico en moldes de arena.

### o. MODELO DE OBJETOS EN MOVIMIENTO GENERAL

Un objeto en movimiento general (OGM) es un cuerpo rígido bajo cualquier tipo de movimiento físico que se acopla dinámicamente con el flujo de fluido o es prescrito por el usuario. Puede moverse con seis grados de libertad (DOF) o girar sobre un punto fijo o un eje fijo. El modelo GMO permite a los usuarios tener múltiples objetos en movimiento en un problema, y cada objeto en movimiento puede tener cualquier tipo de movimiento definido independientemente. Los componentes de OGM pueden ser de un tipo de movimiento mixto, es decir, tienen velocidades de traslación y / o de rotación que se acoplan en algunas direcciones de coordenadas y se prescriben en las otras direcciones. Se emplea un sistema de referencia fijo en el cuerpo ("sistema del cuerpo"), definido para cada objeto en movimiento, y el sistema de referencia espacial ("sistema espacial"). En cada  $\Delta t$ , se calculan la fuerza hidráulica y el par debido a la presión y el esfuerzo de corte, y se resuelven las ecuaciones de movimiento para los objetos en movimiento con movimiento acoplado, considerando las fuerzas y pares de fuerza hidráulica, gravitacional, de resorte y de control. La fuerza y el par no inerciales también se consideran si el sistema espacial no es inercial. Las fracciones de área y volumen se recalculan en cada  $\Delta t$  según las ubicaciones y orientaciones de los objetos actualizados. Los términos de la fuente se agregan en la ecuación de continuidad y en la ecuación de transporte VOF para tener en cuenta el efecto de los objetos en movimiento para desplazar el fluido. La velocidad tangencial de los límites del objeto en movimiento se introduce en términos de tensión de corte en la ecuación de momento. Se encuentran disponibles dos opciones numéricas para el acoplamiento del flujo de fluidos y el movimiento de OGM: un método explícito e implícito. En el primero, los movimientos de fluidos y OGM de cada  $\Delta t$  se calculan utilizando los datos de fuerza y velocidad del  $\Delta t - 1$ . En el método implícito estos se calculan de forma iterativa. El método explícito solo funciona para problemas de objetos pesados (es decir, la densidad del objeto es mayor que la del fluido) y problemas con poca masa agregada. El método implícito, sin embargo, funciona para todo tipo de problemas y es el método numérico recomendado.

Un objeto en movimiento general (OGM) es un cuerpo rígido en cualquier tipo de movimiento físico que se acopla dinámicamente con el flujo de fluido y es prescrito por el usuario. Puede moverse con seis grados de libertad (DOF) o girar sobre un punto fijo o un eje fijo. El modelo OGM permite a los usuarios tener múltiples objetos en movimiento en un problema, y cada objeto en movimiento puede tener cualquier tipo de movimiento. Los componentes de OGM pueden ser de un tipo de movimiento mixto, es decir, tienen velocidades de traslación y / o de rotación que se acoplan en algunas direcciones y se prescriben en las otras. Se utiliza un sistema de referencia fijo en el cuerpo ("sistema del cuerpo"), definido para cada objeto en movimiento, y el sistema de referencia espacial ("sistema espacial"). En cada  $\Delta t$ , se calculan la fuerza hidráulica y el resultado de la presión y el esfuerzo de corte, y se resuelven las ecuaciones de movimiento para los objetos en movimiento con el movimiento acoplado, las fuerzas y los pares de fuerza hidráulica, gravitacional, de producto y de control. La fuerza y el par no inerciales también se consideran como el sistema espacial no inercial. Las fracciones de área y volumen se recalculan en cada  $\Delta t$  según las preferencias y orientaciones de los objetos actualizados.

Los términos de la fuente se agregan en la ecuación de continuidad y en la ecuación de transporte VOF, para tener en cuenta el efecto de los objetos en movimiento al desplazar el fluido. La velocidad tangencial de los límites del objeto en movimiento se introduce en los términos de la tensión de corte en la ecuación del momento. Se encuentran disponibles dos opciones numéricas para el acoplamiento del flujo de fluidos y el movimiento de OGM, un método explícito y otro implícito. En el primero, los movimientos de fluidos y la OGM de cada  $\Delta t$  se calculan utilizando los datos de la fuerza y la velocidad del tiempo anterior. En el método implícito estos se calculan de forma

iterativa. El método explícito solo funciona para problemas de objetos pesados y problemas con poca masa agregada. El método implícito, sin embargo, funciona correctamente.

## o Ecuaciones de movimiento para cuerpo rígido

Para facilitar el cálculo, se configura un sistema de cuerpo (x', y', z') para cada objeto en movimiento con sus ejes de coordenadas paralelos a los del sistema espacial en el tiempo t = 0. Si el movimiento de un objeto tiene seis DOF, el origen del sistema de cuerpo se establece en el centro de masa del objeto G. El sistema del cuerpo está fijo en el objeto en movimiento y experimenta la misma traslación y rotación que el objeto en movimiento. La transformación de coordenadas entre el sistema espacial (x, y, z) y el sistema del cuerpo (x', y', z') es

$$x_s = \lfloor R \rfloor x_b + x_G$$

Ecuación 1.140

donde

- $x_s$  y  $x_b$  son vectores de posición de un punto en el espacio y sistemas corporales, respectivamente
- $x_G$  es el vector de posición del centro de masas en el sistema espacial
- [R] es un tensor de transformación de coordenadas ortogonales

$$[R] = \begin{bmatrix} R_{11} & R_{12} & R_{13} \\ R_{21} & R_{22} & R_{23} \\ R_{31} & R_{32} & R_{33} \end{bmatrix}$$

Ecuación 1.141

donde

•  $R_{ij}R_{jk} = \delta_{ik}$ 

•  $\delta_{ik}$  es el símbolo de Kronecker  $\delta$ 

Es una propiedad de [R] que son sus matrices inversas y transpuestas son iguales. Para un vector espacial A, la transformación entre sistemas espacio y cuerpo es

$$A_s = [R]A_b$$

Ecuación 1.142

donde

- *A<sub>s</sub> y A<sub>b</sub> denota expresiones de A en el espacio y el cuerpo, respectivamente*
- [R] se calcula resolviendo

$$\frac{d[R]}{dt} = [\Omega][R]$$

Ecuación 1.143

donde

$$[\Omega] = \begin{bmatrix} 0 & -\Omega_z & \Omega_y \\ \Omega_z & 0 & \Omega_x \\ \Omega_y & \Omega_x & 0 \end{bmatrix}$$

Ecuación 1.144

 $\Omega_x$ ,  $\Omega_y$ , y  $\Omega_z$  son, x, y y z componentes respectivamente, de la velocidad angular del objeto en el sistema espacial.

 $\Omega_x$  es según la cinemática, el movimiento general de un cuerpo rígido que se puede dividir en un movimiento de traslación y un movimiento de rotación. La velocidad de cualquier punto en un cuerpo rígido es igual a la velocidad de un punto base seleccionado arbitrariamente en el objeto, más la velocidad debido a la rotación alrededor del punto base. Es conveniente seleccionar el centro de masa del objeto, como el punto base para un objeto con movimiento de seis DOF. Denotando P como cualquier punto en el objeto, su velocidad está relacionada con la velocidad del centro de la masa  $V_G$  y la velocidad angular  $\omega$  del cuerpo rígido por

$$V_P = V_G + \omega r_{p/G}$$

Ecuación 1.145

donde  $r_{P/G}$  es la distancia vector de *G* a *P*. El primer término en el lado derecho de la Ecuación 1.145 representa la traslación del centro de masas, y el segundo término representa la rotación sobre el centro de masas. Se observa que  $\omega$  es una propiedad del objeto en movimiento e independiente de la elección del punto base. Las ecuaciones de movimiento que gobiernan los dos movimientos separados son

$$F = m \frac{dV_G}{dt}$$

Ecuación 1.146

У

$$T_G = [J]\frac{d\omega}{dt} + \omega([J]\omega)$$

Ecuación 1.147

donde

- *F* es la fuerza total,
- *m* es la masa corporal rígida,
- $T_G$  es el par total alrededor de G,
- [J] es el momento del tensor de inercia en el sistema corporal ("tensor de inercia"),

$$[J] = \begin{bmatrix} J_{11} & J_{12} & J_{13} \\ J_{21} & J_{22} & J_{23} \\ J_{31} & J_{32} & J_{33} \end{bmatrix}$$

Ecuación 1.148

Los elementos  $J_{11}$  y  $J_{22}$  y  $J_{33}$  son momentos de inercia mientras que los otros elementos producto de inercia,

$$J_{11} = \int (y^{2} + z^{2}) dm$$
,  $J_{22} = \int (x^{2} + z^{2}) dm$ ,  $J_{33} = \int (x^{2} + y^{2}) dm$ 

Ecuación 1.149

$$J_{12} = J_{21} = -\int x'y'dm$$
,  $J_{13} = J_{31} = -\int x'z'dm$ ,  $J_{23} = J_{32} = -\int y'z'dm$ 

Ecuación 1.150

Si los ejes x', y' y z' coordenadas coinciden con los ejes principales del objeto, los productos de inercia desaparecen. Para simplificar el cálculo, Ecuación 1.146 y Ecuación 1.147 se resuelven en sistemas de espacio y cuerpo, respectivamente. La fuerza total y el par total pueden incluir fuerzas hidráulicas, gravitacionales, de resorte, no inerciales, de control, y pares.

Si el movimiento de un objeto es sobre un punto fijo, tiene tres *DOF*. Es conveniente que el sistema de superficie esté configurado con su origen ubicado en el punto fijo. Los ejes de coordenadas del sistema del cuerpo, como se describió anteriormente, son paralelos a los del sistema espacial en t = 0. Marquemos *C* como el punto fijo y  $x_c$  su vector de posición en el sistema espacial, la transformación de coordenadas entre los sistemas del espacio y del cuerpo se puede realizar utilizando la Ecuación 1.140 con sustitución de  $x_G$  por  $x_c$ . Para cualquier punto *P* en el cuerpo rígido, su movimiento es una rotación 3D alrededor del punto fijo y su velocidad:

$$V_P = \omega r_{P/Q}$$

Ecuación 1.151

donde

- $r_{P/C}$  denota la distancia de C a P
- *ω se obtiene resolviendo la Ecuación 1.147 en el sistema con* [*J*] respecto a *C*.

La rotación alrededor de un eje fijo es un movimiento plano, que tiene un solo *DOF*. En este caso, se requiere que el eje de rotación sea paralelo a uno de los ejes de coordenadas. El sistema de cuerpo está configurado con uno de sus tres ejes de coordenadas que coinciden con el eje de rotación y los otros dos paralelos a los del sistema espacial. Dos de las tres coordenadas del origen del sistema del cuerpo son las mismas que las del eje de rotación, y la tercera coordenadas x y z del eje de rotación son  $x_0$  y  $z_0$ , respectivamente, entonces el sistema de cuerpo (x', y', z') se configura con el eje y' que coincide con el eje de rotación mientras x'y z' paralelo a x y z respectivamente, y el origen del sistema del cuerpo se establece en  $(x_0, 0, z_0)$ . La velocidad angular del cuerpo giratorio tiene un solo componente que no es cero y se puede calcular resolviendo el componente correspondiente de la Ecuación 1.147, o

$$T = J\dot{\omega}$$

Ecuación 1.152

Donde T, J y  $\dot{\omega}$  son el par total, el momento de inercia y la aceleración angular sobre el eje fijo en el sistema del cuerpo. La Ecuación 1.151 se utiliza para calcular la velocidad de cualquier punto P en el cuerpo rígido, con C representando cualquier punto en el eje de rotación.

#### o Términos de la fuente en ecuaciones de conservación

La forma general de la ecuación de continuidad basada en el método FAVOR es

$$\frac{\partial}{\partial t} \left( \rho V_f \right) + \nabla (\rho u A) = S_m$$

Ecuación 1.153

donde

•  $S_m$  es un término fuente de masa física de fluido

•  $V_f$  y A son fracciones de volumen y área, respectivamente.

A diferencia de los problemas de obstáculos estacionarios,  $V_f$  y A varían con el tiempo en problemas de objetos en movimiento, por lo tanto, deben considerarse sus efectos en el flujo de fluidos. La Ecuación 1.153 se puede reescribir.

$$\frac{V_f}{\rho}\frac{\partial\rho}{\partial t} + \frac{1}{\rho}\nabla(\rho uA) = -\frac{\partial V_f}{\partial t} + \frac{S_m}{\rho}$$

Ecuación 1.154

Por flujo incompresible, se reduce a

$$\nabla(uA) = -\frac{\partial V_f}{\partial t} + \frac{S_m}{\rho}$$
  
Ecuación 1.155

Comparando con la ecuación de continuidad para problemas de obstáculos estacionarios, se ve que  $-\frac{\partial V_f}{\partial t}$  es equivalente a un término fuente de volumen adicional. Cuando se usa el método de volumen de control, este término de origen solo existe en celdas de malla alrededor del límite del objeto en movimiento. El término  $-\frac{\partial V_f}{\partial t}$  se calcula utilizando

$$-\frac{\partial V_f}{\partial t} = \frac{S_{obj}}{V_{cell}} V_{obj} n$$

Ecuación 1.156

donde

- $V_{cell}$  es el volumen de una celda de malla
- $S_{obj}$ ,  $n \neq V_{obj}$  son, respectivamente, área de superficie, vector normal unidad y velocidad del objeto en movimiento en la celda de malla

La Ecuación 1.156 tiene una buena propiedad de conservación de masa debido a que la generación neta de masa de fluido en todas las celdas de malla alrededor del límite del objeto en movimiento es cercana a cero. También es exacto en el tiempo y no hay mayores dificultades para calcularlo.

Términos similares aparecen en las ecuaciones de transporte para otras cantidades que se resuelven de forma conservadora, como el transporte de energía y escalar.

Se observa que en FLOW-3D se utiliza una forma no conservativa para la ecuación de momento. Esto se obtiene restando la ecuación de continuidad de la forma conservadora de la ecuación de momento. Los términos debidos al cambio de tiempo  $V_f$  se encuentran cancelados, por lo que las ecuaciones de momento en la forma no conservativa mantienen la misma forma que las de los problemas de objetos estacionarios.

La velocidad tangencial no cero de los objetos en movimiento se considera en el cálculo de los términos de esfuerzo cortante en el fluido en la Ecuación 1.9.

#### Ecuaciones dinámicas para colisión de cuerpos rígidos

## - La Ley de Fricción de Coulomb

Supongamos que el cuerpo B colisiona en el cuerpo B ' y su punto de contacto (o punto de colisión) se denota respectivamente como C en el cuerpo B y C' en el cuerpo B'. Un sistema de referencia de colisión (sistema de colisión) se configura con su origen ubicado en el punto de contacto con  $n_1, n_2, n_3$ , que denota los vectores unitarios de sus tres ejes de coordenadas.  $n_3$  es a lo largo de la dirección normal del plano tangencial común de los dos cuerpos en el punto de contacto y se dirige desde el cuerpo B 'al cuerpo B.  $\vec{v}$  represente la velocidad relativa del punto C a C', y  $\vec{p}$  el impulso de la fuerza de contacto en el cuerpo B. En forma vectorial, son

$$\vec{v} = (v_1, v_2, v_3), \quad \vec{p} = (p_1, p_2, p_3)$$
  
Ecuación 1.157

donde el índice inferior representa el componente correspondiente en  $n_1, n_2$ , o  $n_3$ . Ahora simplemente denotamos n para la dirección normal  $n_3$  y p para el impulso normal  $p_3$ , la ley de fricción de Coulomb se escribe

$$\sqrt{(dp_1)^2 + (dp_s)^2} < \mu dp \quad \text{si} \quad v_1^2 + v_2^2 = 0$$
Ecuación 1.158
$$dp_i = -\frac{\mu v_i}{\sqrt{v_1^2 + v_2^2}} dp \quad \text{con} \quad i = 1, 2 \quad \text{si} \quad v_1^2 + v_2^2 = 0$$
Ecuación 1.159

La Ecuación 1.159 también se puede escribir.

$$dp_1 = -\mu\cos\varphi \,dp \,, \quad dp_2 = -\mu\sin\varphi \,dp \,, \quad \text{si} \qquad v_1^2 + v_2^2 > 0$$
  
Ecuación 1.160

donde  $\varphi$  se mide el ángulo de la dirección de deslizamiento desde  $n_1$  a n.

## - Coeficiente de Restitución Energética de Stronge

Como se entiende generalmente, un proceso de colisión se divide en fases de compresión y restitución. La hipótesis de Stronge es relacionar el trabajo realizado por un impulso normal durante la restitución con el de la compresión. El coeficiente energético de restitución de Stronge e se define como

$$e = \sqrt{-\frac{W_3(p_f) - W_3(p_c)}{W_3(p_c)}}$$

Ecuación 1.161

donde

- $W_3$  es un trabajo realizado por impulso normal
- $p_c$  es el impulso normal cuando la colisión alcanza la compresión máxima
- $p_f$  es el impulso total de colisión.

En la Ecuación 1.161 el numerador debajo de la raíz cuadrada es el trabajo total por impulso normal durante la restitución y siempre positivo, y el denominador es el trabajo realizado durante la compresión y siempre es negativo. El valor de e está entre 0 y 1.  $W_3$  se calcula por

$$W_3(p) = \int_0^p v_3 dp$$

Ecuación 1.162

#### • Ecuaciones dinámicas generales

Supongamos que los dos cuerpos B y B 'tienen masa M y M', y sus centros de masa están ubicados en G y G ', respectivamente. En el sistema de colisión, la velocidad relativa en el punto de contacto satisface las ecuaciones de movimiento,

$$dv_i = m_{ij}^{-1} dp_j$$
 (i = 1, 2, 3)

Ecuación 1.163

donde se utiliza la convención de suma de Einstein, y

$$m_{ij}^{-1} = m_{B_{ij}}^{-1} + m_{B_{ij}}^{-1}$$

Ecuación 0.164

en la cual  $m_{B_{ij}}^{-1}$  y  $m_{B_{ij}}^{-1}$  son términos para los cuerpos B y B ', respectivamente. Si ambos cuerpos tienen 6 *DOF*, las expresiones de  $m_{B_{ij}}^{-1}$  y  $m_{B'_{ij}}^{-1}$  son

$$m_{B_{ij}}^{-1} = \frac{1}{M} \delta_{ij} + \varepsilon_{ikm} \varepsilon_{jln} J_{kl}^{-1} r_m r_n \qquad (6 \text{ DOF})$$

Ecuación 1.165

$$m_{B_{ij}}^{-1} = \frac{1}{M} \delta_{ij} + \varepsilon_{ikm} \varepsilon_{jln} J_{kl}^{-1} r_m r_n \qquad (6 \text{ DOF})$$

Ecuación 1.166

donde

- $\delta_{ij}$  es el delta de Kronecker
- $\varepsilon_{ijk}$  es el tensor de permutación
- $J_{kl}^{-1}$  y  $J_{kl}^{-1}$  son la inversa del vector de inercia sobre el centro de masa para los dos cuerpos en el sistema de colisión, respectivamente
- $r_i$  y  $r'_i$  son componentes de los vectores de distancia desde el centro de masa hasta el punto de colisión para los dos cuerpos, respectivamente

## Ecuaciones dinámicas en términos de impulso normal

Si dos cuerpos en colisión se deslizan inicialmente en su punto de contacto, la fricción puede detenerse cuando la colisión es excéntrica y la velocidad inicial de deslizamiento es lo suficientemente pequeña. Después de eso, o bien se adhieren al punto de contacto (llamado deslizamiento) o renuevan el deslizamiento inmediatamente (llamado inversión de deslizamiento) en una nueva dirección hasta que se separan, según la propiedad de inercia de los dos objetos y el coeficiente de fricción. El deslizamiento antes de que ocurra la detención se denomina primera fase de deslizamiento, y la inversa de deslizamiento se denomina a la segunda fase de deslizamiento. Si la fricción no causa el deslizamiento o si la colisión no tiene fricción, solo puede existir la primera fase de deslizamiento a lo largo de la colisión.

Cuando dos objetos se deslizan durante la colisión, los componentes de velocidad tangencial son

$$v_1 = s \cos \varphi$$
,  $v_2 = s \sin \varphi$ 

Ecuación 1.167

donde s esta deslizando a la velocidad,

$$s = \sqrt{v_1^2 + v_2^2}$$

Ecuación 1.168

y  $\varphi$  es la dirección de deslizamiento que varía durante la colisión. Introduciendo la Ley de fricción de Coulomb en la Ecuación 1.160 en la Ecuación 1.163 las ecuaciones

de movimiento en términos del impulso normal p para la primera fase de deslizamiento son

$$\frac{dv_1}{dp} = -\mu m_{11}^{-1} \cos \varphi - \mu m_{12}^{-1} \sin \varphi + m_{13}^{-1}$$

$$Ecuación 1.169$$

$$\frac{dv_2}{dp} = -\mu m_{21}^{-1} \cos \varphi - \mu m_{22}^{-1} \sin \varphi + m_{23}^{-1}$$

$$Ecuación 1.170$$

$$\frac{dv_2}{dp} = -\mu m_{31}^{-1} \cos \varphi - \mu m_{32}^{-1} \sin \varphi + m_{33}^{-1}$$

$$Ecuación 1.171$$

Si los objetos son perfectamente lisos ( $\mu$ =0), entonces Ecuación 1.169 a Ecuación 1.171 son independientes, de lo contrario están acoplados. Las ecuaciones que gobiernan s y  $\varphi$  son

$$\frac{ds}{dp} = m_{13}^{-1}\cos\varphi + m_{23}^{-1}\sin\varphi - \mu m_{11}^{-1}\cos^2\varphi - 2\mu m_{12}^{-1}\sin\varphi\cos\varphi - \mu m_{22}^{-1}\sin^2\varphi = g(\mu,\varphi)$$

Ecuación 1.172

$$s\frac{d\varphi}{dp} = -m_{13}^{-1}\sin\varphi + m_{23}^{-1}\cos\varphi + \mu(m_{11}^{-1} - m_{22}^{-1})\sin\varphi\cos\varphi + \mu m_{12}^{-1}(\sin^2\varphi - \cos^2\varphi) = h(\mu,\varphi)$$
  
*Ecuación 1.173*

Para slip-stick,  $u_1 = u_2 = 0$  y  $\frac{dv_1}{dp} = \frac{dv_2}{dp} = 0$ . La velocidad tangencial cero está acompañada por una fuerza de fricción tangencial a lo largo de una dirección constante  $\overline{\varphi} - \pi$ . Se muestra [Stronge-2000],

$$\overline{\varphi} = \tan^{-1} \left( \frac{m_{11}^{-1} m_{23}^{-1} - m_{12}^{-1} m_{13}^{-1}}{m_{22}^{-1} m_{13}^{-1} - m_{23}^{-1} m_{12}^{-1}} \right)$$
Ecuación 1.174

Componentes del impulso diferencial de la fuerza tangencial en  $n_1$  y  $n_2$  satisfacen.

$$dp_1 = -\overline{\mu}\cos\overline{\varphi} \, dp$$
,  $dp_2 = -\overline{\mu}\sin\overline{\varphi} \, dp$   
 $\sqrt{(dp_1)^2 + (dp_2)^2} = \overline{\mu}dp$   
Ecuación 1.175

dónde  $\overline{\mu}$  es el coeficiente de golpeo,

$$\overline{\mu} = \frac{\sqrt{\left(m_{11}^{-1}m_{23}^{-1} - m_{12}^{-1}m_{13}^{-1}\right)^2 + \left(m_{22}^{-1}m_{13}^{-1} - m_{23}^{-1}m_{12}^{-1}\right)^2}}{m_{11}^{-1}m_{22}^{-1} - m_{12}^{-1}m_{12}^{-1}}$$

Ecuación 1.176

y  $\overline{\mu} < \mu$ . Las ecuaciones de movimiento son así.

$$v_1 = 0$$
  

$$v_2 = 0$$
  

$$\frac{dv_3}{dp} = -\overline{\mu}m_{31}^{-1}\cos\overline{\varphi} - \overline{\mu}m_{32}^{-1}\sin\overline{\varphi} + m_{33}^{-1}$$
  
Ecuación 1.177

Durante la segunda fase de deslizamiento, o inversión de deslizamiento, ecuaciones de movimiento Ecuación 1.169 a Ecuación 1.171 siguen siendo válidas. Sin embargo, a diferencia de la primera fase de deslizamiento en la que la dirección de deslizamiento varía durante la colisión, el deslizamiento en la segunda fase es a lo largo de una dirección constante. Se obtiene resolviendo  $h(\mu, \varphi) = 0$  en la Ecuación 1.173 para  $\varphi$ . Puede haber múltiples soluciones de  $\varphi$ . La dirección de deslizamiento es la única solución satisfactoria  $ds/dp = g(\mu, \varphi) > 0$  que se define en la Ecuación 1.172.

Si la fricción hace que el deslizamiento se detenga, la comparación del coeficiente de fricción  $\mu$  y el coeficiente de la palanca  $\overline{\mu}$  determinará si después de eso se produce la inversión de la palanca o la reversión del deslizamiento. Si  $\overline{\mu} < \mu$ , se consigue slip-stick. De lo contrario, la reversión de deslizamiento ocurre inmediatamente.

#### p. MODELO DE DISOLUCION DE SOLUTO

La disolución del soluto sólido en líquido puede ser de interés en varias aplicaciones, desde la extracción de soluciones hasta el procesamiento de alimentos y aplicaciones médicas. Esta sección describe un modelo para disolver soluto sólido en fluidos y rastrear el soluto en la salmuera.

La disolución del soluto sólido aumenta la densidad del fluido y, por lo tanto, puede afectar el flujo. Además, a medida que se disuelve el soluto, aumenta el dominio de flujo. El modelo explica los fenómenos físicos básicos, como la transferencia de masa en la interfaz entre sólido y fluido, el cambio de volumen y la forma del soluto sólido, la difusión y la convección del soluto disuelto en el fluido y, finalmente, el cambio en la densidad del fluido, viscosidad y coeficiente de tensión superficial. La cantidad de soluto disuelto en el fluido se representa con su concentración de masa. La ecuación de transporte para C es

$$\frac{\partial C}{\partial t} + (u\nabla)C = \nabla(D\nabla C) + Q$$
Ecuación 1.178

donde ues la velocidad del fluido y D es el coeficiente de difusión del soluto disuelto en el fluido. El flujo de masa del soluto Q en el límite fluido / sólido se define como

$$Q = k(C_{SAT} - C)$$

Ecuación 1.179

donde k es el coeficiente de transferencia de masa constante y  $C_{SAT}$  es la concentración de saturación de soluto. Se supone que la densidad  $\rho$  de la mezcla fluida es una función lineal de la concentración:

$$\rho = \rho_0 + \alpha C$$
Ecuación 1.180

Donde  $\rho_0$  es la densidad del líquido puro y  $\alpha$  es una constante obtenida experimentalmente. En consecuencia, el volumen del fluido varía con la concentración, también de forma lineal:

$$V = V_0 \left[ 1 + (1 - \alpha) \frac{c}{\rho_0} \right]$$
  
Ecuación 1.181

El coeficiente de densidad de la mezcla  $\alpha$  puede tomar valores en el rango  $1 - \rho_0/\rho_s$  entre solutos de sustitución ( $\rho_0$  es la densidad del soluto sólido), cuando las moléculas de disolvente están completamente desplazadas por las moléculas más grandes del soluto, y 1.0 para solutos intersticiales, cuando las moléculas de soluto más pequeñas encajan perfectamente en los espacios entre las moléculas del disolvente.

Por ejemplo, la densidad del agua de mar saturada (salmuera) a temperatura ambiente es aproximadamente un 26% mayor que la densidad del agua dulce, mientras que su volumen aumenta en un 13%, lo que resulta en  $\alpha = 0.5$ 

Tenga en cuenta que no hay cambios en el volumen de la mezcla después de la disolución cuando  $\alpha = 1.0$ . Este supuesto también se puede utilizar como una simplificación del modelo si:

- la velocidad de la interfaz controlada por la velocidad de disolución es pequeña en comparación con la velocidad promedio del fluido; y
- Las concentraciones de soluto son pequeñas en comparación con la densidad del fluido.

Las ecuaciones de flujo son

$$\nabla u = S$$
  
$$\frac{\partial u}{\partial t} + (u\nabla)u = -\frac{1}{\rho}\nabla P + \frac{1}{\rho}\nabla(\mu\nabla u) + g$$
  
Ecuación 1.182

 $A_f$  es un fluido a presión P, viscosidad  $\mu$  y gravedad g. El término S fuente explica el cambio en la posición del límite entre el fluido y el soluto sólido, así como el aumento en el volumen específico del fluido.

El método de representación de área fraccionada / obstáculo de volumen (FAVOR) se utiliza para representar la geometría cambiante del soluto sólido. Para explicar la presencia de soluto sólido en el dominio de flujo y su cambio en el volumen y la forma a medida que se disuelve en el fluido, se ha desarrollado una variante del modelo

General Moving Object (GMO). Mientras que el modelo estándar de OMG describe el movimiento de los objetos rígidos que se mueven a través del dominio de flujo, el modelo de soluto sigue el cambio del límite de soluto sólido del componente de disolución estacionario. Ambos modelos utilizan fracciones de área y volumen dependientes del tiempo para representar la geometría cambiante en la cuadrícula rectangular fija. Estas variables se actualizan en cada  $\Delta t$  para reflejar los cambios en la ubicación del límite del componente. Las cantidades de líquidos, como la presión y la velocidad, deben inicializarse en las células recién abiertas. Las fuentes de volumen y los sumideros también se calculan en los límites móviles para mantener la continuidad del fluido y el sólido.

En el modelo aumentado, el componente de geometría que representa el soluto sólido se designa como un componente de un tipo de disolución. Es estacionario, pero cambia de forma y volumen. Se designa con la variable de entrada *IFOBDISS* (*NOB*) = 1, donde NOB es el número de componente. Las fracciones de área y volumen se vuelven a calcular en cada  $\Delta t$  para reflejar la disolución gradual del soluto sólido. La variable principal que representa dicho componente de geometría es el volumen relativo (fraccional) de soluto sólido en una celda, que es la relación entre el volumen sólido en la celda y el volumen total de la celda:

$$V_{f,solute} = V_{solute}/V_{cell}$$
  $0 \le V_{f,solute} \le 1.0$   
Ecuación 1.183

La fracción de volumen abierto en la celda, o fracción de volumen, es entonces

$$V_f = 1.0 - V_{f,solute}$$

Ecuación 1.184

La fracción de área  $A_f$  en la cara de una celda, se calcula a partir de las fracciones de volumen en las dos celdas que comparten la cara (subíndices 1 y 2 en la Ecuación 1.185 a continuación), de acuerdo con las siguientes reglas ordenadas:

$$A_f = 0.5^* (V_{f1} + V_{f2})$$
  
Ecuación 1.185

Si 
$$A_{f1} = 1$$
 o  $A_{f2} = 1$  entonces  $A_f = 1$   
Si  $A_{f1} = 0$  o  $A_{f2} = 0$  entonces  $A_f = 0$ 

La tasa de cambio del contenido de soluto sólido en una celda computacional se define como:

$$\frac{dVf_{salt}}{dt} = \frac{QdA}{\rho_S V_{cell}}$$

Ecuación 1.186

donde

- *dA* es el área mojada de superficie sólida en la célula
- $\rho_s$  es la densidad del soluto sólido

El término sumidero S en la Ecuación 1.182 está reflejando la continuidad de fluido y sólido en la interfaz y el cambio en el volumen del fluido a medida que se disuelve el soluto,

$$S = \frac{dV f_{salt}}{dt} + \frac{Q dA}{\rho_0 V_{cell}} (1 - \alpha) = \frac{Q dA}{V_{cell}} \left(\frac{1}{\rho_s} + \frac{1 - \alpha}{\rho_0}\right)$$
  
Ecuación I

.187



Figura 1.7 Esquema de la región de la interfaz en el modelo númerico

En la figura anterior se observa que el área sombreada a la derecha de la interfaz está ocupada por un componente de disolución que representa el soluto sólido cuya forma y volumen varían con el tiempo. El soluto disuelto se distribuye en el fluido dentro del volumen advacente a la interfaz marcada por la línea discontinua delgada. La línea discontinua gruesa muestra el volumen de soluto sólido en la celda.

La cantidad de soluto disuelto en un incremento de tiempo dado  $d_m = Q dA dt$ , se distribuye sobre un volumen fluido adyacente a la interfaz igual al volumen de la celda de malla que contiene la interfaz (rectángulo de línea discontinua delgada en la figura de arriba). Si la celda interfacial está parcialmente llena de fluido, entonces parte del soluto disuelto se distribuirá a una celda vecina. Dicho promedio de la concentración de soluto hace que la solución sea menos dependiente de la posición de la interfaz dentro de una celda y es consistente con el enfoque de control de volumen, donde cada volumen está asociado con un solo valor de concentración de soluto.

Se supone que la velocidad de disolución del soluto sólido está limitada por la difusión, es decir, el soluto disuelto debe difundirse fuera de la interfaz antes de que se pueda disolver más. El volumen de soluto disuelto en un incremento de tiempo dt por unidad de área es Qdt. En el mismo período de tiempo, la cantidad de soluto que se difunde desde la interfaz hacia el volumen es aproximadamente  $\rho \sqrt{Ddt}(C_{SAT} - C)$ . La comparación de las dos expresiones impone un límite al coeficiente de transferencia de masa de soluto efectivo:

$$k_{eff} = min\left(k, \rho \sqrt{\frac{D}{dt}}\right)$$

Ecuación 1.188

Una vez que el soluto disuelto se ha asignado a los volúmenes de control, la difusión y la convección toman el control, puede redistribuirse aún más el soluto dentro de la mezcla.

#### q. MODELO DE POLIESTIRENO PERDIDO

En el proceso de fundición de poliestireno perdido, el poliestireno ocupa la cavidad del molde y ofrece una resistencia al flujo de metal. El impulso juega solo un pequeño papel en el proceso de pérdida de poliestireno.

El poliestireno se representa con un tipo especial de obstáculo que impide el flujo de metal a menos que se caliente lo suficiente como para perder su resistencia. En este sentido, el movimiento del metal en el poliestireno se controla mediante mecanismos de transferencia de calor y no por presión o inercia del metal.

Cuando el metal ingresa en un volumen de control que contiene poliestireno, se calcula el calor transferido al poliestireno desde el metal durante un incremento de tiempo. Esta cantidad se usa para calcular el volumen de poliestireno que se descompone y eleva a la temperatura del metal. Cuando se calcula la cantidad de poliestireno descompuesta, es necesario incluir los calores de transformación para fundir y vaporizar el poliestireno. La energía transferida al poliestireno se elimina del metal. La conducción térmica en el poliestireno se ignora en el modelo.

El metal avanza a través de la acción de un sumidero igual a la cantidad de volumen de poliestireno eliminado en cada volumen de control. El sumidero se especifica en términos de componentes de velocidad en la superficie del metal, lo que hace que el metal se mueva en el poliestireno mientras la presión en el metal sea lo suficientemente alta.

La velocidad promedio del frente de metal u, se puede estimar como

$$u = \frac{HOBS}{RCOBS}$$

Ecuación 1.189

dónde:

- HOBS1 es el coeficiente de transferencia de calor de metal / poliestireno
- RCOBS es la densidad del poliestireno por el producto de calor específico.

No se ha intentado modelar directamente el flujo de gas producido a partir del poliestireno vaporizado. La importancia del gas es bien conocida en términos del efecto

que las diferentes permeabilidades del recubrimiento en el patrón de poliestireno pueden tener en el rendimiento de una fundición. Con una permeabilidad insuficiente, la acumulación de gas puede expulsar el metal del molde. Los efectos de la permeabilidad del revestimiento se incluyen aproximadamente en el presente modelo a través de un cambio en el coeficiente de transferencia de calor de metal / poliestireno. El razonamiento detrás de esto es que la tasa de transferencia de calor debe ser proporcional al grosor de la región del gas. Un recubrimiento de baja permeabilidad resultaría en la acumulación de gas y reduciría la transferencia de calor.

Se puede tener en cuenta el efecto de la gravedad en el cálculo del coeficiente de transferencia de calor de metal / poliestireno utilizando la variable *CGFOB*. Dado que los productos de descomposición del poliestireno son generalmente más ligeros que el metal, pueden desplazarse por el metal avanzando hacia abajo y acumularse sobre el frente de metal que se está moviendo hacia arriba. Por lo tanto, uno puede esperar un espacio interfacial más pequeño cuando el metal está por encima del poliestireno que en la situación inversa. Este efecto se describe al hacer que el coeficiente de transferencia de calor de metal / poliestireno sea una función del componente de gravedad, *GHT* normal al frente de metal / poliestireno

$$h = HOBS1\left(1 + sign(CGFOB, GHT)\frac{GVEL}{GVEL \frac{HOBS1}{RCOBS}}\right)$$
  
Ecuación 1.190

Donde

$$GVEL = \sqrt{|GHT|} ROUGH$$

Ecuación 1.191

*ROUGH* es una rugosidad definida por el usuario para cada obstáculo de poliestireno. El parámetro de rugosidad describe la escala de longitud característica de las irregularidades de la superficie en la interfaz de metal / poliestireno (un valor de 0,1 cm es razonable). De acuerdo con la expresión, el coeficiente de transferencia de calor entre el metal y el poliestireno es mayor cuando el metal está por encima del poliestireno, lo que facilita que el metal avance mejor hacia abajo que hacia arriba. El valor recomendado para *CGFOB* es 0.5.

Existe un modelo de llenado simplificado especial, IFLFOAM = 2, que se puede usar para determinar patrones de llenado generales y localizar posibles fuentes de defectos que surgen de la convergencia de los frentes metálicos (pliegues). Este modelo, sin embargo, no proporciona información sobre distribuciones de temperatura o velocidad, defectos de superficie o solidificación.

Para una mejor convergencia de la iteración de presión, se recomienda utilizar un pequeño grado de compresibilidad limitada estableciendo *RCSQL* en un valor de alrededor de 10-6 en unidades CGS o en un valor del orden de 0.1 (presión máxima estimada del fluido).

#### r. MODELOS DE MEDIOS POROSOS

Suelos, rocas fracturadas, esponjas y papel son todos ejemplos de medios porosos. Los medios porosos se refieren a materiales sólidos con vacíos intersticiales conectados a través de los cuales puede fluir el fluido. En una escala microscópica, las velocidades y presiones en los espacios vacíos son altamente irregulares, pero desde un punto de vista macroscópico, un enfoque de volumen promedio representa el flujo bastante bien.

El tamaño de los vacíos en relación con las dimensiones generales del material sugiere la conveniencia de modelar un material como poroso frente a simular cada vacío individual. Por ejemplo, aunque una hoja de papel es bastante delgada, el tamaño de los huecos dentro de la hoja es mucho más pequeño. Si el flujo promedio a través del papel es interesante, sería apropiado tratar el papel como un medio poroso con ciertas propiedades macroscópicas de promedio de volumen, como la porosidad. Sin embargo, si el comportamiento de absorción en una pequeña región dentro del papel, debido a la distribución de fibra anisotrópica, es de interés, cada fibra debería estar representada en la simulación. Para que el concepto de promedio de muchos poros sobre el volumen de una celda de cómputo sea válido, el tamaño de los vacíos debe ser mucho más pequeño que el volumen de control.

Figura 1.8 Interfaz de gas y líquido (1)

Como se puede apreciar en la figura anterior, en la izquierda tenemos un modelo poroso, que es apropiado cuando el tamaño de los poros es mucho más pequeño que el tamaño de volumen de control, por ejemplo, arenisca y polvo compactado. A la derecha, un modelo discreto (cada sólido modelado) es apropiado cuando el tamaño de los poros está en el mismo orden que el volumen de control y los detalles de flujo en los poros son de interés. Por ejemplo, micro flujos en esteras de fibra.

## s. ECUACIONES GOBERNANTES EN MEDIOS POROSOS

La porosidad de un medio poroso se define como el volumen abierto dividido por el volumen total. En la nomenclatura FLOW-3D, la porosidad es idéntica a la fracción de volumen  $V_f$ .

$$Porosity = V_f$$

Ecuación 1.192

Los materiales tales como los filtros de espuma metálica están casi completamente abiertos y pueden tener porosidades que se aproximan a 1.0. La porosidad de las esferas compactas varía de un 25% a un 47% dependiendo de la configuración del embalaje.

Al construir un modelo continuo del material poroso y aplicar promedios a cada volumen de control, se obtienen las ecuaciones de conservación habituales. La conservación de la masa se expresa mediante la ecuación.

$$V_f \frac{\partial \rho_f}{\partial t} + \nabla (\rho_f U) = 0$$

Ecuación 1.193

Dónde U es la velocidad de flujo macroscópico. Se puede formar una ecuación de impulso en medios porosos según la observación realizada por el ingeniero francés Henry Darcy en 1856, quien observó que el caudal unidireccional a través de medios porosos es proporcional a la diferencia de presión aplicada. Esta relación se expresa como

$$U = -\frac{\kappa}{\mu} \frac{\partial P}{\partial x}$$

Ecuación 1.194

donde el coeficiente K es la permeabilidad específica o intrínseca del material. K generalmente es independiente del fluido y tiene dimensiones de longitud al cuadrado. La Ecuación 1.194 se conoce como ley de Darcy. Los valores K de los materiales comunes son  $10^{-7} \sim 10^{-9} m^2$  para grava y  $10^{-13} \sim 10^{-16} m^2$  para arcilla. Cuanto menor es el valor de la permeabilidad, mayor es la resistencia al flujo. Esta resistencia se conoce comúnmente en el modelado de medios porosos como arrastre. La resistencia al flujo en un medio poroso se representa en las ecuaciones de Navier-Stokes como un término de arrastre proporcional a la velocidad

$$b = F_d U$$
  
Ecuación 1.195

Dónde  $F_d$  es el coeficiente de arrastre de medios porosos. La permeabilidad K se puede expresar en términos del coeficiente de arrastre  $F_d$  según

$$K = \frac{V_f \mu}{\rho F_d}$$
 Ecuación 1.196

Antes de discutir los diversos tipos de modelos de arrastre disponibles en FLOW-3D, debe observarse que hay dos regímenes de flujo posibles dentro del medio poroso: saturado e insaturado. Un flujo saturado es uno en el que la interfaz entre el gas y el líquido es relativamente aguda. Un flujo insaturado es uno en el que la interfaz entre el gas y el líquido es difusa y puede mostrar regiones de gas atrapadas y agitadas.



Figura 1.9 Interfaz de gas y líquido (2)

#### Cálculos de arrastre en flujos saturados

Dado que la permeabilidad K está determinada por los factores geométricos en lugar de las propiedades del fluido, es posible derivar K de parámetros geométricos como el tamaño de partícula y el diámetro de la fibra. La ecuación de Carmen-Kozeny Ecuación 1.197 se deriva de la teoría del radio hidráulico y se establece como

$$K = \frac{D^2 V_f^3}{180(1 - V_f)^2}$$

Ecuación 1.197

donde D es el diámetro de la partícula o fibra y 180 se conoce como la constante Carmen-Kozeny. La Ecuación 1.197 da buenos resultados cuando el medio poroso consiste en formas casi esféricas de tamaño similar. Algunos investigadores han descubierto que la constante de Carmen-Kozeny depende de la porosidad y la relación de aspecto de la fibra.

#### Arrastre Dependiente De La Porosidad

Para tener en cuenta los efectos de la porosidad K, la ecuación utilizada en FLOW-3D es

$$F_d = a V_f^{-b}$$

Ecuación 1.198

Donde  $a ext{ y } b$  son constantes positivas. Se puede usar un valor de b cero cuando se desea un coeficiente de arrastre constante. Se pueden elegir valores separados de  $a ext{ y } b$  para cada componente individual, haciendo que el uso de b sea en gran parte redundante, ya que el valor de  $V_f$  es invariante dentro de cada componente. La Ecuación 1.198 es válida en flujos saturados en medios porosos donde el número de Reynolds para poros, calculado a partir de

$$Re_p = \frac{\rho UD}{\mu}$$

Ecuación 1.199

es menor que 1. Esto suele ser cierto para flujos de baja velocidad o para medios porosos con tamaños de poros pequeños.

### o Arrastre dependiente de la saturación

Otra opción para un arrastre lineal modela una forma dependiente de la saturación de fluidos:

$$F_d = a F^{-b}$$
  
Ecuación 1.200

Donde F es la fracción (o saturación) de fluido local, y a y b son constantes positivas. Dado que el valor de F de los materiales porosos saturados es igual a uno, excepto en la interfaz entre las regiones de líquido y gas, solo tendrá un efecto cerca de la interfaz.

### o Arrastre dependiente del número de Reynolds

Si un medio poroso está compuesto de partículas o fibras gruesas, la velocidad microscópica puede ser significativa y las pérdidas de flujo que induce pueden ser proporcionales al cuadrado de la velocidad del flujo, además de ser una función lineal de la velocidad. Este es típicamente el caso cuando  $Re_d > 10$ . Las ecuaciones de pérdida de flujo lineal (Darcian) y cuadrática (no Darcian) pueden combinarse en una sola expresión para  $F_d$ 

$$F_d = \frac{\mu}{\rho} \frac{1 - V_f}{V_f} \left[ a \frac{1 - V_f}{V_f} + b \frac{Re_p}{D} \right]$$

Ecuación 1.201

donde

- $a = \alpha/D^2$
- $b = \beta/D$
- La constante  $\alpha$  típicamente tiene el valor de 180 y  $\beta$  es un factor de rugosidad en el rango de 1.8 a 4.0 (suave a rugoso).
- El parámetro a debe especificarse para cada componente poroso para evitar el flujo no físico. El valor b predeterminado es cero

## Presión capilar

Dentro de un medio poroso saturado, los efectos de la tensión superficial en el interfaz fluido / gas pueden ser significativos si el fluido está humedecido fuertemente o no humedecido en relación con el material poroso. Esta presión capilar surge debido a las altas curvaturas de la superficie presentes en los pequeños poros del material. Cuando el fluido humedece el material (es decir, el ángulo de contacto estático es menor que 90°), se produce la absorción y la absorción del fluido en un medio poroso. Cuando el fluido y el material poroso no se humedecen, ocurre lo contrario y se debe aplicar presión externa para forzar el fluido en el material. La fuerza de la dinámica de humectación o no humectación del medio poroso se define por la presión capilar.

El valor de la presión capilar se basa en el diámetro promedio de los poros, la tensión superficial del líquido embebedor y el ángulo de contacto estático con el material poroso y puede estimarse utilizando

$$P_{CAP} = \frac{4\sigma\cos\theta}{D}$$

Ecuación 1.202

donde  $\sigma$  está el coeficiente de tensión superficial del fluido,  $\Theta$  es el ángulo de contacto estático del fluido en relación con el sólido poroso y *D* es el diámetro promedio de poro. El método de determinación más preciso  $P_{CAP}$  es experimentalmente mediante el uso de aparatos de laboratorio.

La presión capilar representada por la Ecuación 1.202 se aplica al interfaz líquido / gas (celdas donde la fracción de fluido es menor que 1.0 y mayor que 0.0).

#### Flujo insaturado en medios porosos

El modelo de medio poroso insaturado está diseñado para simular dos fases (generalmente líquido y gas) que se entremezclan en diversos grados a lo largo del medio poroso. Por lo tanto, la fracción de fluido (la fracción de volumen local del espacio poroso ocupado por el líquido es similar a la saturación,) varía a lo largo del medio. En FLOW-3D, la técnica de volumen de fluido (VOF) se utiliza para rastrear esta fracción de fluido F.

El arrastre es una función de la saturación porque hay más resistencia al flujo dentro de un material poroso donde hay dos fases que una sola fase. Esto se debe a las muchas burbujas pequeñas que son difíciles de desalojar debido a los fuertes efectos de la tensión superficial en escalas pequeñas.

#### o Cálculos de arrastre en flujos no saturados

Se han incorporado dos modelos de arrastre para flujo insaturado en FLOW-3D. El modelo de arrastre más simple para flujo insaturado, el modelo de "ley de potencia", está representado por

$$F_d = a S^{-b}$$

Ecuación 1.203

Dónde S es el grado de saturación. La saturación S se calcula a partir de

$$S = \frac{F - F_{CMN}}{F_{CMX} - F_{CMN}}$$

Ecuación 1.204

donde

- F es la fracción de fluido dentro del volumen de control
- $F_{CMN}$  es la saturación irreducible
- $F_{CMX}$  es el límite máximo de saturación para el medio poroso.

Estos límites de saturación se refieren a la fracción de volumen de líquido cuando ya no se puede eliminar más líquido del material y cuando no se puede agregar más, respectivamente.  $F_{CMN}$  y  $F_{CMX}$  se calculan en relación con el volumen de poro abierto del material en particular.

Otra opción para un modelo de arrastre en medios porosos insaturados es

$$F_d = a \frac{F}{F - F_{CMN}} S^{-P_{EXP}} \exp[b(1-S)]$$

Ecuación 1.205

donde  $P_{EXP}$  es una constante definida por el usuario.

En regiones donde no hay fluido, F se limita a un valor mínimo de  $10^{-6}$  si  $F_{CMN}$  no se establece. Puede ser necesario definir un valor F inicial mayor que  $F_{CMN}$  o agregar algo de F difusión para evitar el gran arrastre que resulta de la Ecuación 1.205 cuando F está cerca de  $F_{CMN}$ . De lo contrario, se puede evitar que el fluido ingrese a las regiones donde F se aproxima  $F_{CMN}$ .

### Presión capilar en flujos no saturados

La presión capilar también es una función de la saturación local. En las regiones del medio donde la saturación es baja, existen múltiples interfaces con un alto grado de curvatura y una presión capilar muy alta resultante. A la inversa, en regiones saturadas, hay pocas superficies libres y la presión capilar está cerca de cero.

En FLOW-3D, hay dos curvas de presión capilar calculadas, una para cuando el material se está drenando (es decir, la saturación está bajando) y la otra para cuando el material se está llenando (es decir, la saturación está aumentando). La relación entre la presión capilar y la saturación se muestra en el diagrama para los flujos de avance (curva de llenado) y los flujos de retroceso (curva de drenaje).



Figura 1.10 Curva de drenaje

La curva de drenaje se define como

$$P_{CAP,DRAIN} = P_{BUB} S^{-P_{exp}}$$
  
Ecuación 1.206

Donde

- $P_{BUB}$  es la presión capilar máxima en condición de saturación  $F = F_{CPMX}$
- *S* es la saturación.

La presión de burbujeo,  $P_{BUB}$  se define como

$$P_{BUB} = P_{PCMX} \left( \frac{F_{PCMX} - F_{CMN}}{F_{CMX} - F_{CMN}} \right)^{P_{exp}} Ecuación 1.207$$

La curva de llenado se define como

$$P_{CAP,FILL} = P_{BUB}(S^{-P_{exp}} - 1)$$
  
Ecuación 1.208

## o Transición entre curvas de drenaje y relleno

Al evaluar  $P_{CAP}$ , que se realiza en la subrutina *pcapcl* accesible por el usuario, se obtiene una primera estimación de la nueva presión capilar en el tiempo n + 1 del valor anterior al suponer una variación a lo largo de la curva de exploración

Cuando una región local del material cambia de relleno a drenaje (o viceversa), la presión capilar sigue una curva de exploración entre las curvas. La pendiente de esta curva de exploración se calcula a partir de la pendiente local de la curva de drenaje, más 10 veces la diferencia local entre la curva objetivo (ya sea drenaje o llenado) y la presión calculada localmente hasta que la curva de exploración se interseca con la curva objetivo.

Si se espera que una simulación involucre solo el llenado o el drenaje de una región, entonces solo es necesario especificar la curva de presión contra saturación capilar apropiada. Sin embargo, cuando hay alternantes transitorios de llenado y drenaje, entonces deben considerarse ambas curvas y deben proporcionarse algunos medios para la transición numérica entre estos procesos.

Experimentalmente, se observa que la transición se produce a lo largo de una curva de "exploración". Esta curva debe tener una pendiente mayor que las pendientes de las curvas de llenado y drenaje, de lo contrario no sería posible pasar entre ellas. Debido a que no se han encontrado datos experimentales como guía, se ha establecido arbitrariamente la pendiente de la curva de exploración. Utilizamos un valor igual a la pendiente de la curva de drenaje en el valor actual de F más una pendiente adicional calculada como la diferencia entre las presiones de la curva de llenado y drenaje en la saturación F dividida por un cambio en la saturación de 0.1.

Al evaluar, que se realiza en la subrutina pcapel accesible por el usuario, se obtiene una primera estimación de la nueva presión capilar en el  $\Delta t$  del valor  $\Delta t - 1$  al suponer una variación a lo largo de la curva de exploración

$$P_{CAP}^{n+1} = P_{CAP}^{n} + \frac{dP_{CAP}}{dF} (F^{n+1} - F^{n})$$
  
Ecuación 1.209

donde  $dP_{CAP}/dF$  es la pendiente de la curva de barrido en la saturación actual. El nuevo valor luego se prueba contra los valores de la curva de llenado  $P_{CAP,FILL}$  y drenaje  $P_{CAP,DRAIN}$ , de tal manera que:

$$P_{CAP}^{n+1} = max(P_{CAP}^{n+1}, P_{CAP,FILL})$$
  

$$Ecuación 1.210$$
  

$$P_{CAP}^{n+1} = max(P_{CAP}^{n+1}, P_{CAP,DRAIN})$$
  
Ecuación 1.211

Estas pruebas aseguran que la presión capilar se encuentre entre los límites impuestos por las dos curvas, o en el caso de una sola curva, mantener  $P_{CAP}$  en esa curva. Este comportamiento se puede personalizar modificando la subrutina *pcapcl*.

## o Solidificación del Modelo De Arrastre

Se puede construir un modelo simplificado para el cambio de fase de sólido a líquido utilizando el concepto de arrastre de medios porosos. Al descuidar los cambios de volumen asociados con un cambio de fase y al suponer que el material sólido está en reposo con respecto a la malla computacional, podemos aproximar los procesos de solidificación (es decir, el estado de velocidad de flujo cero) utilizando un coeficiente de arrastre que es una función de la fracción sólida local.

El arrastre debe ser efectivamente infinito cuando el material está en la fase sólida. En los estados intermedios que consisten en una pasta, el arrastre debe asumir un valor intermedio. En FLOW-3D, el coeficiente de arrastre es

$$F_d = TSDRG \frac{F_s^2}{(1-F_s)^3}$$

Ecuación 1.212

Donde  $F_s$  es la fraccion solida local. Cuando  $F_s = FSCR$ , el coeficiente de arrastre K, se vuelve infinito. FSCR es una constante definida por el usuario que denota el valor de la fracción sólida crítica que se apodera de todo el flujo en la zona blanda. TSDRG es una constante definida por el usuario. Su valor depende de la microestructura de la zona blanda cuyo modelado está fuera del alcance del modelo de solidificación en FLOW-3D. Es probable que la elección real para TSDRG dependa de la aplicación específica y, en general, requerirá alguna confirmación con datos experimentales. Cuando el valor de TSDRG se establece en cero, no se aplica ninguna fuerza de arrastre al fluido en la región blanda.

El modelo de arrastre de D'Arcy para el flujo de fase líquida en la zona blanda dado por las Ecuación 1.194 y Ecuación 1.212 se pueden mejorar para incluir efectos de flujo adicionales en fracciones sólidas altas y bajas. A bajos valores de fracción sólida  $F_s < FSCO$ , los cristales de la fase sólida del *FSCO* son escasos y flotan libremente en el líquido sin formar una estructura sólida coherente [AFS-1996]. La mezcla sólida / líquido se puede aproximar como un solo fluido con la viscosidad de la mezcla dependiente de la fracción sólida de acuerdo con

$$\mu = \mu_0 \left( 1.0 - \frac{\min(F_s, FSCO)}{FSCR} \right)^{-1,55}$$
Ecuación 1.213

Donde  $\mu_0$  es la viscosidad molecular de la fase liquida. El coeficiente de arrastre *K* en este rango de valores de fracción sólida es cero. A medida que la solidificación continúa y la fracción sólida alcanza el punto de coherencia, *FSCO*, se supone que la fase solidificada forma una estructura rígida. En este caso, la viscosidad del fluido se mantiene en el valor dado por la Ecuación 1.222 con  $F_s = FSCO$  y el término de arrastre dado por la Ecuación 1.212 se aplica. Esto continúa hasta que la fracción sólida excede la fracción sólida crítica, *FSCR*, en cuyo punto se detiene el flujo.

Tanto FSCO como FSCR son constantes definidas por el usuario. Se asume en el modelo que

# $0.0 \le FSCO < FSCR \le 1.0$

Ecuación 1.214

Además, la fase sólida se puede mover a una velocidad lineal uniforme (que puede depender del tiempo) como ocurre durante un proceso de fundición continua.

Otros modelos podrían incorporarse a FLOW-3D alterando las subrutinas drgcl, en las que se calcula el coeficiente de resistencia, y la *mucal*, donde se calcula la viscosidad del fluido.

El concepto del arrastre de solidificación y la viscosidad efectiva descritos por las Ecuación 1.212 y Ecuación 1.213 se basan en la importante suposición de que existe una zona blanda dentro del rango de solidificación a través del cual fluye la fase líquida. Este supuesto no es cierto para materiales con un rango de cero de congelación, como los metales puros. En este caso, ayuda a que la precisión del modelo sea un pequeño intervalo de congelación artificial que se introduce del orden de 0,1 a 1,0 grados.

# t. DINÁMICA DE CUERPOS RÍGIDOS PARA MARCO DE REFERENCIA NO INERCIAL

A veces nos interesa el flujo de fluidos dentro de cuerpos rígidos cuyo movimiento está influenciado por la dinámica del fluido. En tales casos, se puede aplicar el modelo de dinámica de cuerpo rígido acoplado, integrado en FLOW-3D, para predecir el movimiento combinado del cuerpo rígido y el fluido asociado.

Consideraremos la evaluación del movimiento de un cuerpo rígido en relación con el espacio inercial. Además, supondremos que el cuerpo contiene cavidades internas (tanques) que pueden estar parcialmente llenas de líquido. Deseamos simular el movimiento del centro de masa del cuerpo rígido, su rotación (actitud) y el movimiento del fluido en sus tanques. La simulación es predecir estos atributos a medida que avanza el tiempo. La evaluación del movimiento del fluido y las fuerzas y pares resultantes se realizan con los algoritmos FLOW-3D habituales, lo que permite la inclusión de una amplia variedad de fenómenos físicos.


Figura 1.11 Coordenadas inerciales y fijas en el cuerpo

Para realizar esta simulación, definimos marcos de referencia tanto inerciales como fijos en el cuerpo, como se muestra en la figura anterior. Etiquetamos las coordenadas cartesianas fijadas en el cuerpo rígido como (x, y, z) y las fijadas en el espacio inercial como (x', y', z'). El cálculo de dinámica de fluidos utiliza las coordenadas fijas en el cuerpo como de costumbre. La ecuación de Newton para la ubicación del centro de masa del cuerpo rígido se resuelve en el marco de referencia inercial, pero las ecuaciones para la rotación del cuerpo se formulan en coordenadas fijas en el cuerpo.

También definimos un marco de referencia de cuerpo gravitatorio, cuyo origen coincide con el del sistema de coordenadas de inercia pero que puede girar a una velocidad constante sobre el eje z'. Utilizamos un sistema de coordenadas esféricas para este marco de referencia para reducir la confusión. Este marco de referencia no se utiliza en la formulación de las ecuaciones de movimiento. Está pensado como una conveniencia para el usuario, ya que relaciona directamente los resultados calculados con un sistema basado en tierra

El efecto de la fuerza gravitatoria que emana de este cuerpo se incluye en las ecuaciones de movimiento de cuerpo rígido y las ecuaciones de movimiento de fluidos. Los pares resultantes del campo gravitatorio se han ignorado.

Se han previsto medidas para la inclusión de fuerzas y pares ambientales y de control. Esto se logra incluyendo subprogramas que pueden comunicarse fácilmente con las otras partes del algoritmo. Estos subprogramas no modelan fuentes específicas de fuerza y torsión, pero están disponibles para que el usuario incluya fenómenos tales como efectos aerodinámicos y geomagnéticos o chorros de control y / o volantes.

# u. MODELO DE SEDIMENTO

El modelo de arrastre de sedimentos estima el movimiento del flujo de sedimentos prediciendo la erosión, advección y deposición de sedimentos. Lo hace por:

- Cálculo de la advección (difusión) del sedimento suspendido en el flujo.
- Cálculo del asentamiento de sedimentos por gravedad.
- Cálculo del arrastre del sedimento debido al cizallamiento y las perturbaciones del flujo.
- Cálculo del transporte conocido como transporte de carga de cama, por el cual las partículas de sedimento ruedan o rebotan a lo largo del fondo.

En FLOW-3D, esto se hace considerando dos estados en los cuales puede existir sedimento, sedimento suspendido y compactado. El sedimento suspendido es típicamente de baja concentración y se denomina fluido # 1. El sedimento compactado no se mueve con ningún fluido y existe en el dominio computacional en la fracción crítica de compactación, según lo define el usuario.

Los sedimentos en suspensión se transportan por suspensión junto con el fluido. Por lo tanto, sin considerar las funciones VOF y FAVORTM, la ecuación de transporte para cada especie de sedimento i es

$$\frac{\partial c_{s,i}}{\partial t} + \nabla \left( \bar{u} c_{s,i} \right) = 0$$
*Ecuación 1.215*

donde,  $c_s$  es la concentración del sedimento suspendido, en unidades de masa por unidad de volumen y  $\bar{u}$  es la velocidad media de la mezcla de fluido / sedimento.

Debido a que los sedimentos típicamente tienen una densidad mayor que el fluido circundante, se hundirán, o se desviarán en relación con el fluido circundante. La tasa de esta deriva está relacionada con el equilibrio entre la fuerza de flotación (la fuerza que causa la deriva) y la fuerza de arrastre (la fuerza que resiste la deriva). Por lo tanto, uno puede escribir balances de momento para cada especie de sedimento y la mezcla fluido-sedimento (nuevamente descuidando las funciones VOF y FAVOR):

$$\frac{\partial u_{s,i}}{\partial t} + \bar{u}\nabla u_{s,i} = -\frac{1}{\rho_{s,i}}\nabla P + F - \frac{K_i}{f_{s,i}\rho_{s,i}}u_{r,i} \quad (a)$$
$$\frac{\partial \bar{u}}{\partial t} + \bar{u} \ \nabla \bar{u} = -\frac{1}{\rho}\nabla P + F \quad (b)$$

Ecuación 1.216

donde

- $u_{s,i}$  es la velocidad de las especies de sedimentos i
- $\rho_{s,i}$  es la densidad del material del sedimento
- $f_{s,i}$  es la fracción volumétrica de las especies de sedimentos i
- *P* es la presión

- *K* es la función de arrastre
- *F* Incluye cuerpo y fuerzas viscosas
- $u_{r,i}$  es la velocidad relativa

$$u_{r,i} = u_{s,i} - u_f$$

Y la velocidad principal

$$\bar{u} = \left(1 - \sum_{j=1}^{N} f_{s,j}\right) u_f + \sum_{j=1}^{N} f_{s,j} u_{s,j}$$

Ecuación 1.218

Dónde N es el número total de especies de sedimentos. Restando la Ecuación 1.216 b) de Ecuación 1.216 a) tenemos,

$$\frac{\partial u_{drift,i}}{\partial t} + \bar{u} \ \nabla u_{drift,i} = \left(\frac{1}{\rho} - \frac{1}{\rho_{s,i}}\right) \nabla P - \frac{K_i}{f_{s,i}\rho_{s,i}} u_{r,i}$$
Ecuación 1.219

dónde  $u_{drift,i} = u_{s,i} - \bar{u}$  está la velocidad de deriva, es decir, la velocidad necesaria para calcular el transporte de sedimentos debido a la deriva.

Suponiendo que el movimiento del sedimento es casi constante en la escala del tiempo computacional y que el término de suspensión es pequeño (para una pequeña velocidad de deriva  $u_{drift}$ ), el resultado de la Ecuación 1.219 es

$$u_{r,i} = \frac{\nabla P}{\bar{\rho}K_i} (\rho_{s,i} - \bar{\rho}) f_{s,i}$$

Ecuación 1.220

Donde la densidad de la mezcla  $\bar{\rho}$  es

$$\bar{\rho} = \sum_{i=1}^{N} f_{s,i} \rho_{s,i} + \left(1 - \sum_{i=1}^{N} f_{s,i}\right) \rho_{f}$$

Ecuación 1.221

Tenga en cuenta que, en muchas simulaciones, el gradiente de presión puede volverse muy ruidoso, especialmente cerca de la superficie libre. Para la mayoría de los problemas, la relación del gradiente de presión y la densidad de la mezcla es típicamente igual a la aceleración de la gravedad g. Con esta suposición obtenemos

$$u_{r,i} = \frac{g}{K_i} \left( \rho_{s,i} - \bar{\rho} \right) f_{s,i}$$

Ecuación 1.222

Una opción razonable para la función de arrastre  $K_i$ , combina arrastre de forma y arrastre de Stokes:

$$K_{i} = \frac{3}{4} \frac{f_{s,i}}{d_{s,i}} \left( C_{D,i} \| u_{r,i} \| + 24 \frac{\mu_{f}}{\rho_{f} d_{s,i}} \right)$$

Ecuación 1.223

dónde:

- $d_{s,i}$  y  $C_{D,i}$  son el diámetro y el coeficiente de arrastre para las especies de sedimentos *i*, respectivamente.
- $\mu_f$  es la viscosidad del fluido (generalmente agua).

Cuando la fracción de volumen del material dispersado no se está desvaneciendo, el uso de una fuerza de arrastre de una sola partícula para calcular el intercambio de momento entre los componentes no es del todo correcto. La corrección utilizada con mayor frecuencia para tener en cuenta las interacciones partícula / partícula es una relación determinada experimentalmente conocida como correlación de Richardson-Zaki.

La correlación de Richardson-Zaki depende de la partícula de número de Reynolds  $R_e = (2\rho_c R_p U/\mu_c)$ . La correlación consiste en reemplazar la velocidad de deriva multiplicando el valor computado  $u_r$ , por la fracción de volumen del componente dispersado elevado a una potencia  $\zeta$ 

> $u_{r,i}^{eff} = u_{r,i}(f_s)^{\zeta}$ Ecuación 1.224

El exponente  $\zeta$  es el producto del coeficiente de Richardson-Zaki y el multiplicador del coeficiente de Richardson-Zaki proporcionado por el usuario:

$$\zeta = \zeta_{user} \zeta_0$$
*Ecuación 1.225*

Dónde  $\zeta_{user}$  es el multiplicador del coeficiente de Richardson-Zaki y  $\zeta_0$  se define por:

$$\begin{array}{ll} R_e < 1.0 & \zeta_0 = 4.35/R_e^{0.03} \\ 1.0 < R_e < 500 & \zeta_0 = 4.45/R_e^{0.1} \\ 500 < R_e & \zeta_0 = 2.39 \end{array}$$

El valor ajustado, o efectivo, se utiliza para el cálculo de todos los flujos de deriva. Esta correlación solo se utiliza en relación con el modelo de arrastre de partículas cuadráticas.

Finalmente, la velocidad de deriva se calcula a partir de la velocidad relativa utilizando la definición de la velocidad de deriva y las velocidades relativas:

$$u_{drift,i} = (1 - f_{s,i})u_{r,i}^{eff} - \sum_{j=1}^{N(-i)} f_{s,j}u_{r,j}$$

Las Ecuación 1.222, Ecuación 1.223 y Ecuación 1.226 se resuelven mediante la fórmula cuadrática para encontrar  $u_{drift,i}$ 

Los sedimentos son arrastrados por la recolección y la re-suspensión de los sedimentos compactados debido al cizallamiento y pequeños remolinos en la interfaz de sedimentos compactados. Debido a que no es posible calcular la dinámica de flujo de cada grano individual de sedimento y muchas veces es difícil calcular la capa límite en la interfaz, se debe usar un modelo empírico. El modelo utilizado aquí se basa en Mastbergen y Van den Berg [Mastbergen-VandenBerg-2003]. Además, la ecuación de Shields-Rouse [Guo-2002] se puede usar para predecir el número crítico de Shields, o se puede especificar un parámetro definido por el usuario. El primer paso para calcular el número crítico de Shields es calcular el parámetro adimensional  $R_i^*$ 

$$R_{i}^{*} = d_{s,i} \frac{\sqrt{0.1(\rho_{s,i} - \rho_{f})\rho_{f} ||g|| d_{s,i}}}{\mu_{f}}$$
  
Ecuación 1.227

y a partir de esto, el parámetro Shields crítico sin dimensiones se calcula utilizando la ecuación de Shields-Rouse [Guo-2002],

$$\theta_{cr,i} = \frac{0.1}{R_i^{*\frac{2}{3}}} + 0.054 \left[ 1 - exp\left(\frac{-R_i^{*0.52}}{10}\right) \right]$$
  
Ecuación 1.228

También se incluyen en el modelo los efectos de la armadura, por lo que las partículas de sedimento más grandes protegen las partículas más finas para evitar que se arrastre. El primer paso es el cálculo del tamaño de partícula promedio local en la celda computacional

$$d_{50} = \frac{1}{\sum_{i=1,ns} c_{s,i}} \sum_{i=1,ns} c_{s,i} d_{s,i}$$
*Ecuación 1.229*

Dónde  $c_{s,i}$  es la concentración masiva de especies de sedimentos i. El parámetro de escudos críticos se modifica luego por los efectos de blindaje [Kleinhans-2002]

$$\theta_{cr,i} = \theta_{cr,i} \frac{1.666667}{\log_{10} \left(19 \frac{d_{s,i}}{d_{50}}\right)^2}$$

Ecuación 1.230

Tenga en cuenta que, de acuerdo con la Ecuación 1.230 si  $d_{s,i}$  es mucho más pequeño que  $d_{50}$ , el denominador será un número pequeño y por lo tanto aumentará el valor de  $\theta'_{cr,i}$ , porque las partículas más finas están rodeadas por partículas más grandes. A la inversa, para valores  $d_{s,i}$  mucho mayores que  $d_{50}$ , la Ecuación 1.230 servirá para reducirlo, porque las partículas más gruesas están más expuestas cuando están rodeadas de partículas más finas.

El parámetro de escudos críticos se modifica aún más para que las superficies inclinadas incluyan el ángulo de reposo. La idea aquí es que, en interfaces inclinadas, el sedimento compactado es menos estable, por lo tanto, es arrastrado más fácilmente por el fluido en movimiento. La modificación altera aún más  $\theta_{cr,i}$ [Soulsby-1997]

$$\theta_{cr,i}^{''} = \theta_{cr,i}^{'} \frac{\cos\psi\sin\beta + \sqrt{\cos^2\beta \ \tan^2\varphi_i - \sin^2\psi \ \sin^2\beta}}{\tan\varphi_i}$$
  
Ecuación 1.231

donde el ángulo  $\beta$  calculado de la interfaz empaquetada es normal en relación con el vector gravitacional  $g, \varphi$  es el ángulo de reposo definido por el usuario para las especies de sedimentos *i*, y es el ángulo  $\psi$  entre el flujo y la dirección de la pendiente ascendente. Por lo tanto, para fluir directamente por una pendiente  $\psi = 0^{\circ}$ 

El número local de Shields se calcula en función de la tensión de corte local au

$$\theta_i = \frac{\tau}{\|g\| d_{s,i} (\rho_{s,i} - \rho_f)}$$

Ecuación 1.232

Aquí ||g|| está la magnitud del vector gravitacional.

La velocidad de elevación del arrastre (flujo volumétrico) del sedimento se calcula como [Mastbergen-VandenBerg-2003]

$$u_{lift,i} = \alpha_{i} n_{s} d_{*}^{0.3} (\theta_{i} - \theta_{cr,i})^{1.5} \sqrt{\frac{\|g\| d_{s,i} (\rho_{s,i} - \rho_{f})}{\rho_{f}}}$$

Ecuación 1.233

dónde  $d_*$  es el diámetro medio de las partículas sin dimensiones,

$$d_{*} = d_{50} \left( \frac{\rho_{f} (\rho_{s,i} - \rho_{f}) ||g||}{\mu^{2}} \right)^{1/3}$$
  
Ecuación 1.234

1,

 $\alpha_i$  es el parámetro de arrastre, cuyo valor recomendado es 0.018 [Mastbergen-VandenBerg-2003], y  $n_s$  es la dirección hacia afuera normal a la interfaz de lecho compactado.  $u_{lift,i}$  luego se usa para calcular la cantidad de sedimento compactado que se convierte en sedimento suspendido, actuando efectivamente como una fuente de masa de sedimento suspendido en la interfaz del lecho compactado. Una vez convertido en sedimento suspendido, el sedimento avanza y deriva posteriormente.

El transporte de carga de la cama es el modo de transporte de sedimentos debido a que se enrolla o rebota sobre la superficie del lecho de sedimentos compactado. Para el transporte de carga de cama, el modelo utilizado actualmente es de Meyer, Peter y Muller [Soulsby-1997]. Este modelo predice el flujo volumétrico de sedimento por unidad de ancho sobre la superficie del lecho compactado. El modelo es

$$\Phi_{i} = \beta_{i} \left( \theta_{i} - \theta_{cr,i}^{"} \right)^{1.5}$$
Ecuación 1.235

donde  $\theta_i$  es como se describe en la Ecuación 1.232,  $\theta_{cr,i}$  es de la Ecuación 1.231 y  $\Phi_i$  es la tasa de transporte de carga de cama adimensional, y está relacionada con la tasa de transporte de carga de cama volumétrica por unidad de ancho  $q_i$  por

$$q_{b,i} = \Phi_i \left[ \|g\| \left( \frac{\rho_{s,i} - \rho_f}{\rho_f} \right) d_{s,i}^3 \right]^{1/2}$$

Ecuación 1.236

donde ||g|| es el vector gravitacional y  $\beta_i$  es típicamente igual a 8.0 [VanRijn-1984].

La Ecuación 1.236 calcula el flujo de carga de la cama en unidades de volumen por ancho de cama y por tiempo. Para una estimación del grosor de la carga del lecho, se calcula con [VanRijn-1984] el grosor del sedimento.

$$\frac{\delta_i}{d_{50}} = 0.3 d_*^{0.7} \left(\frac{\theta_i}{\theta_{cr,i}} - 1\right)^{0.5}$$

Ecuación 1.237

Por lo tanto, para calcular el movimiento del sedimento en cada celda computacional, el valor de  $q_{b,i}$  se convierte en una velocidad mediante [VanRijn-1984]:

$$u_{bedload,i} = \frac{q_{b.i}}{\delta_i f_{b,i}}$$

Ecuación 1.238

 $f_{b,i}$  es la fracción de volumen de sedimento *i* en la capa de carga del lecho; [VanRijn-1984]

$$f_{b,i} = 0.18 \frac{f_{packed}}{d_*} \left( \frac{\theta_i}{\theta_{cr,i}} - 1 \right)$$
Equation 1.23

Ecuación 1.239

La dirección del movimiento se determina a partir del movimiento del líquido adyacente a la interfaz del lecho lleno. Por lo tanto, el flujo volumétrico es

$$u_{bedload,i} = u_{bedload,i} \frac{\overline{u}}{\|\overline{u}\|}$$

Ecuación 1.241

 $\bar{u}/\|\bar{u}\|$  representa la dirección de la mezcla de fluido-sedimento adyacente a la interfaz compactada, y la velocidad de carga del lecho resultante  $u_{bedload,i}$  se utiliza para transportar el sedimento compactado. El flujo de masa resultante del sedimento tal como se calcula a través de los límites de células computacionales en FLOW-3D es

$$Q_{b,i} = u_{bedload,i} \delta_i f_{b,i} \rho_{s,i}$$

y de ahí la  $\delta_i$  y  $f_b$  de la Ecuación 1.238 están cancelados.

### v. MODELO DE AGUAS POCO PROFUNDAS

Un flujo superficial es aquel en el que la extensión horizontal es mucho más grande que la vertical. Los ejemplos incluyen flujo en el mar, estuarios, grandes lagos, inundaciones estacionales, recubrimientos líquidos, películas lubricantes y agua en parabrisas de automóviles.

Se puede demostrar que, en un flujo superficial, la aceleración vertical del fluido es despreciable, y es una buena aproximación al modelo tridimensional completo para reemplazar todas las variables de flujo por sus equivalentes promediados en profundidad [Pedlosky-1987]. Las ecuaciones tridimensionales del movimiento se reducen a ecuaciones bidimensionales en el plano horizontal, denominadas ecuaciones de aguas someras o modelo de aguas someras. Con este modelo, la superficie libre de fluidos es libre de exhibir fenómenos de onda. Los límites horizontales no uniformes (por ejemplo, una playa en pendiente) también pueden inducir pequeñas desviaciones del flujo puramente horizontal. En este sentido, la aproximación promediada en profundidad todavía incluye algunos efectos tridimensionales. Hay excelentes discusiones sobre las ecuaciones de aguas poco profundas y sus refinamientos de orden superior en las referencias [Knauss-1978], [Su-Gardner-1969].

El modelo de aguas poco profundas en FLOW-3D asume que la dirección superficial es la dirección z y la gravedad está en la dirección z negativa. Cuando se aplica un promedio de profundidad a la ecuación de momento tridimensional en la dirección z, se reduce a una relación hidrostática para la presión

$$p = p_0 + \rho g(\eta - z)$$
  
Ecuación 1.242

en términos de densidad del fluido  $\rho$ , aceleración vertical de la gravedad g, elevación de fluido  $\eta$  medida desde z = 0 y presión externa en la superficie libre  $p_0$  que incluye el efecto de la fuerza de tensión superficial.

En FLOW-3D, el flujo de aguas poco profundas puede residir en una sola capa vertical de volúmenes de control (es decir, la primera capa de celdas reales en la dirección z). La presión en un elemento que contiene una superficie libre se define como

$$p = p_0 + \rho g H$$
  
Ecuación 1.243

donde H mide la elevación de la superficie desde la parte inferior de la cuadrícula H. Es, por lo tanto, la suma de la profundidad del fluido y la altura del obstáculo.

$$H = FV_F \delta_z + (1 - V_F) \delta_z$$
  
Ecuación 1.244

Dónde  $\delta_z$  es el tamaño de la celda en la dirección z, F es la fracción de fluido y  $V_F$  la fracción de volumen (fracción del volumen abierto en la celda).

Los bloqueos de volumen / área utilizados en el método FAVOR pueden interpretarse como la altura del contorno inferior. Al hacer esta correspondencia, solo es necesario asegurarse de que todas las aproximaciones utilizadas en FLOW-3D consideran que el bloqueo sólido se encuentra en la parte inferior de los volúmenes de control.

Aplicando el promedio de profundidad a las ecuaciones de momento tridimensional en la dirección horizontal, obtenemos las ecuaciones de momento para el modelo de aguas poco profundas,

$$\frac{\partial u}{\partial t} + \frac{1}{V_F} \left( uA_x \frac{\partial u}{\partial x} + vA_y \frac{\partial u}{\partial y} \right) = -\frac{1}{\rho} \frac{\partial p}{\partial x} + G_x + \frac{\tau_{s,x} + \tau_{b,x}}{\rho d} + 2\Omega v$$

Ecuación 1.245

$$\frac{\partial v}{\partial t} + \frac{1}{V_F} \left( uA_x \frac{\partial v}{\partial x} + vA_y \frac{\partial v}{\partial y} \right) = -\frac{1}{\rho} \frac{\partial p}{\partial y} + G_y + \frac{\tau_{s,y} + \tau_{b,y}}{\rho d} - 2\Omega u$$
  
Ecuación 1.246

Donde  $u \neq v$  son la profundidad y velocidad promediada  $x \neq y$  respectivamente. Una suposición adicional hecha en las Ecuación 1.245 y Ecuación 1.246 es que la difusión viscosa en dirección horizontal es despreciable en comparación con la difusión en la dirección vertical. El tercer término en el lado derecho explica el efecto promediado en profundidad de la difusión viscosa en la dirección vertical, que se relaciona con la suma de la tensión de cortadura del viento en la superficie libre y la tensión de cortadura en el fondo del depósito. Aquí d es la profundidad del agua;  $\tau_{s,x} \neq \tau_{s,y}$  son la tensión de cizalladura del viento en la superficie del fluido en  $x \neq y$  direcciones, respectivamente;  $\tau_{b,x} \neq \tau_{b,y}$  son los  $x \neq y$  componentes de la tensión de corte inferior, respectivamente.

$$\tau_{s,x} = \rho_a C_D W_{10,x} \sqrt{W_{10,x}^2 + W_{10,x}^2}$$

Ecuación 1.247

$$\tau_{s,y} = \rho_a C_D W_{10,y} \sqrt{W_{10,y}^2 + W_{10,y}^2}$$

donde

- $\rho_a$  es la densidad del aire
- $C_D$  es el coeficiente de resistencia al viento que es típicamente igual a 0.003
- $W_{10,y}^2$  y  $W_{10,x}^2$  son las velocidades del viento a 10 m sobre la superficie del agua, respectivamente

La Ecuación 1.248 asume que la velocidad del viento es mucho mayor que la del fluido.

Para flujo turbulento, el modelo de aguas poco profundas no utiliza ninguno de los modelos turbulentos en FLOW-3D. En su lugar, utiliza una ley cuadrática para evaluar la tensión de corte inferior,

$$\tau_{b,x} = -\rho C_D u \sqrt{u^2 + v^2} \qquad \tau_{b,y} = -\rho C_D v \sqrt{u^2 + v^2}$$
  
Ecuación 1.249

donde  $C_D$  está el coeficiente de arrastre con un valor típico de 0.0026. Para flujo laminar  $\tau_{b,x}$  y  $\tau_{b,y}$  se calculan como

$$\tau_{b,x} = -k_{\mu}\mu \frac{u}{d/2} \qquad y \qquad \tau_{b,y} = -k_{\mu}\mu \frac{v}{d/2}$$
  
Ecuación 1.250

Donde  $k_{\mu}$  está el multiplicador de viscosidad vertical que está diseñado para compensar la falta de perfil de velocidad en la dirección vertical. Para un flujo de corte de estado estable que tiene un perfil de velocidad cuadrática en la dirección vertical, el valor teórico  $k_{\mu}$  es 1.5.

El último término en la Ecuación 1.245 o Ecuación 1.246 representa la fuerza de Coriolis debido a la rotación de la Tierra. La fuerza de Coriolis es importante para el flujo de fluidos geofísicos, como los del mar, los estuarios y los grandes lagos. En este término,  $\Omega$  es la componente vertical de la velocidad angular de la tierra,

$$\Omega = \Omega_e sen \varphi$$

Ecuación 1.251

donde

•  $\Omega_e = 7.29 \ 10^{-5} \text{ rad / s es la velocidad angular de la Tierra}$ 

φ es la latitud constante (es decir, promedio para el dominio de flujo).
 Es positivo en el hemisferio norte y negativo en el hemisferio sur.

Profundidad que promedia la ecuación de continuidad tridimensional y luego sustituye la elevación del fluido utilizando la Ecuación 1.244 y considerando las fracciones de área apropiadas para las direcciones x e y, llegamos a

$$\frac{\partial V_F F}{\partial t} + \frac{\partial u A_x F}{\partial x} + \frac{\partial v A_y F}{\partial y} = 0$$

Esta es precisamente la ecuación F utilizada en el método VOF para el flujo en una sola capa horizontal de volúmenes de control, siempre que no haya transporte F en la dirección z, que es una restricción necesaria en el modelo de flujo. El método VOF para flujo de agua poco profunda permite que el fluido se mueva hacia regiones secas o se retire de regiones previamente húmedas

Las Ecuación 1.243, Ecuación 1.245, Ecuación 1.246 y Ecuación 1.252 se pueden resolver explícitamente, en cuyo caso, existe una limitación en el tamaño del paso del tiempo para evitar que las ondas de gravedad muevan más de una celda en la cuadrícula de una vez. También está disponible una solución implícita e iterativa que elimina la limitación en el tamaño del intervalo de tiempo. La opción implícita se usa por defecto.

El modelo de aguas poco profundas se puede combinar con la solución 3D completa en un enfoque híbrido, utilizando una malla de bloques múltiples. Un bloque de malla dado es del tipo de aguas poco profundas o 3D. Los bloques de cualquier tipo se interconectan entre sí en sus límites comunes. Los bloques se pueden vincular entre sí (no se superponen) y / o se pueden anidar dentro de otros bloques (completamente superpuestos).

Un bloque de malla del tipo de aguas poco profundas debe tener al menos dos celdas definidas en la dirección, con la parte inferior que contiene todo el fluido y la capa superior sin fluido. No hay razón para tener más de dos celdas, ya que solo se permite que el fluido exista en la capa más inferior de las celdas. Por lo tanto, el tamaño de celda en la dirección debe ser lo suficientemente grande como para contener todo el fluido en esa capa a lo largo de la simulación. Se genera un error si el fluido se cruza en una capa superior de células. Las celdas en la segunda capa de celdas deben dejarse vacías de fluido y geometría. Esto permitirá al modelo tratar adecuadamente la superficie libre en la capa inferior.

# w. SOLIDIFICACIÓN, CONTRACCIÓN Y MODELOS DE POROSIDAD.

FLOW-3D se puede utilizar para modelar procesos de fundición, como inyección a alta presión, vertidos por gravedad e inclinación, y fundición centrífuga y por compresión. Una de esas aplicaciones es modelar la contracción volumétrica durante la solidificación, que es una causa común de defectos de porosidad que conducen a malas propiedades mecánicas del producto final.

La porosidad en el metal de solidificación se produce como resultado de la evolución del gas y de los cambios volumétricos (es decir, la contracción) durante la transformación de fase. Hay dos modelos en FLOW-3D que pueden emplearse para predecir la formación de macro porosidad en los metales debido a la contracción. El

primer modelo implica la solución del sistema completo de ecuaciones hidrodinámicas. Como resultado, se puede predecir la evolución de la velocidad y la presión en el metal solidificado. Por lo tanto, este modelo se denomina modelo de encogimiento hidrodinámico o primeros principios (PF).

Las ecuaciones de continuidad y energía Ecuación 1.5 y Ecuación 1.21 se modifican para incluir términos de fuente volumétrica. Estos se definen por la tasa de solidificación y la diferencia de densidad sólido / líquido. La base del modelo es que el material se contrae cuando se solidifica, y esto induce cierta tensión en el material en forma de una presión reducida que intenta extraer el líquido circundante para reemplazar el volumen perdido por la contracción. Si el líquido circundante está confinado y no puede fluir, la presión continuará disminuyendo con una contracción adicional hasta que se alcance la presión crítica. En ese punto se permite abrir una cavidad de contracción. La presión crítica puede estar relacionada con la presión típica a la cual los gases disueltos salen de la solución.

A pesar de ser una herramienta precisa para estudiar los fenómenos de formación de porosidad, el modelo de PF puede ser computacionalmente costoso porque en cada  $\Delta t$  el algoritmo numérico implica la solución completa de las ecuaciones de impulso y energía. El tamaño de la etapa de tiempo, controlado por varios criterios de estabilidad asociados con el flujo de fluido, también puede ser pequeño en comparación con el tiempo de solidificación total de la fundición. Este último puede ser tan largo como horas para grandes piezas.

Otro posible método simplificado se basa únicamente en la solución de las ecuaciones de energía del metal y del molde. En este caso no se resuelven ecuaciones de flujo de fluidos. La porosidad se predice al evaluar el volumen de la contracción de la solidificación en cada región líquida aislada en el vaciado en cada  $\Delta t$ . Este volumen se resta luego de la parte superior de la región líquida de acuerdo con la cantidad de metal líquido disponible en las células de las cuales se extrae el fluido. La "parte superior" de una región líquida se define por la dirección de la gravedad. La relevancia de este enfoque se apoya en el hecho de que en muchas situaciones se puede ignorar el flujo de fluido en el metal solidificado. La formación de porosidad en ese caso se rige principalmente por el enfriamiento del metal y la gravedad. La alimentación debida a la gravedad a menudo se produce en una escala de tiempo mucho más pequeña que el tiempo total de solidificación. Este modelo se llama modelo de reducción simplificada de solidificación (SSS). El modelo SSS en FLOW-3D proporciona una herramienta simple para realizar simulaciones rápidas en moldes complicados.

Ninguno de los modelos incluye la evolución de los gases, por lo tanto, el volumen de porosidad se define por la velocidad de enfriamiento y la diferencia de densidad sólido / líquido.

El aspecto más importante del modelado por contracción en FLOW-3D es que las cavidades por retracción se describen explícitamente, por lo tanto, también se tiene en cuenta su influencia en el flujo de fluido y calor. No se incluye expansión volumétrica, por ejemplo, debido a la fusión que también se incluye en estos modelos.

Ambos modelos de contracción dan cuenta de los cambios de volumen que se producen durante la solidificación, así como durante el enfriamiento de la fase líquida antes de que comience a solidificarse.

El modelo de Reducción de Solidificación Simplificada también está acoplado al modelo de Solidificación de Hierro Fundido que describe la evolución de las fases de hierro gamma (austenita), grafito y carburo durante la solidificación eutéctica [Carter-Starobin-2011]. La evolución de estas fases afecta la densidad y, por lo tanto, los cambios volumétricos de la aleación solidificante. El metal puede contraerse o expandirse durante la solidificación de una pieza fundida, dependiendo de las composiciones iniciales de carbono y silicio de la aleación, así como de la velocidad de enfriamiento. La contracción del líquido al enfriar también se incluye en el modelo.

El modelo de contracción de flujo completo no tiene en cuenta los cambios de densidad debidos a la formación de grafito y carbono durante la solidificación del hierro fundido. En cambio, los cambios de volumen en ese modelo se definen por la expansión / contracción térmica de la fase líquida y las densidades de las fases líquida y sólida.

Además de los modelos de contracción diseñados para predecir la formación de macro cavidades, FLOW-3D calcula una variedad de funciones de solidificación que pueden usarse para evaluar la aparición de micro porosidad y algunas características microestructurales [Overfelt-1992]. Estos son:

- Velocidad de Solidus,  $V_s$  que es la velocidad de la isoterma de Solidus en el momento de la solidificación.
- Gradiente térmico, G en el momento de la solidificación.
- Velocidad de enfriamiento, R en el momento de la solidificación. Tiempos de solidificación locales y absolutos,  $t_l$  y  $t_a$
- El tiempo de solidificación local es el tiempo que se tarda en enfriar el metal de liquidus a solidus.
- Índice de eficiencia de alimentación  $G/t_l$ , esta función se puede visualizar trazando la variable *SLDCF2*.
- Función de criterio de Niyama  $G/\sqrt{R}$ . Esta función se puede visualizar trazando la variable *SLDCF1*.
- Criterio de Lee, Chang y Chieu (LCC)  $\left(\frac{G}{V_s}\right) t_l^{2/3}$ , Esta función se puede visualizar trazando la variable *SLDCF3*

# x. MODELOS DE TURBULENCIA

La turbulencia es el movimiento caótico e inestable de los fluidos que ocurre cuando no hay suficientes fuerzas viscosas estabilizadoras. En los números altos de Reynolds, las inestabilidades naturales que ocurren dentro del flujo no se amortiguan y se manifiestan en la formación de remolinos de varios tamaños. Este comportamiento se observa fácilmente en el flujo de un grifo o en una corriente de rápido movimiento por las estrías visibles en la superficie libre. La turbulencia también puede ser importante en los procesos industriales: el llenado a presión a alta presión es ciertamente turbulento, como lo son casi todos los procesos de flujo de mediana a gran escala.

En resumen, la turbulencia está a nuestro alrededor y no se puede ignorar en el modelado de flujo numérico. Idealmente, podríamos simular, con las ecuaciones de conservación de masa y de momento, el espectro completo de fluctuaciones turbulentas. Esto es posible solo si la resolución de la malla es suficiente para capturar tales detalles. Sin embargo, esto generalmente no es posible debido a las limitaciones de tiempo de procesamiento y memoria de la computadora. Por lo tanto, debemos recurrir a modelos simplificados que describan los efectos de la turbulencia en las características del flujo medio.

En FLOW-3D, hay cinco modelos de turbulencia disponibles: el modelo de longitud de mezcla Prandtl, la ecuación de una ecuación, los modelos de dos ecuaciones y RNG, y una gran simulación de Eddy y modelo LES. La formulación Flow-3D, sin embargo, difiere ligeramente de otras formulaciones en que se incluye la influencia de las áreas / volúmenes fraccionales del método FAVOR y se ha generalizado la producción de turbulencia (o descomposición) asociada con las fuerzas de flotabilidad. La última generalización, por ejemplo, incluye efectos de flotabilidad asociados con aceleraciones no inerciales.

#### y. MODELOS DE TRANSPORTE POR TURBULENCIA

El modelo de transporte de turbulencia de una sola ecuación consiste en una ecuación de transporte para la energía cinética específica asociada con las fluctuaciones de velocidad turbulentas en el flujo (la energía cinética turbulenta)

$$k_T = \frac{1}{2} \left( \overline{u^{\prime 2}} + \overline{v^{\prime 2}} + \overline{w^{\prime 2}} \right)$$

Ecuación 1.253

Donde u', v', w', son los componentes de la velocidad del fluido asociada con caóticas fluctuaciones turbulentas.

La ecuación de transporte Ecuación 1.253 incluye la convección y difusión de la energía cinética turbulenta, la producción de energía cinética turbulenta debido a los efectos de cortadura y flotabilidad, la difusión y la disipación debidas a pérdidas viscosas dentro de los remolinos. La producción de flotabilidad solo ocurre si hay una densidad no uniforme en el flujo, e incluye los efectos de la gravedad y las aceleraciones no inerciales. La ecuación de transporte es:

$$\frac{\partial k_T}{\partial t} + \frac{1}{V_F} \left( uA_x \frac{\partial k_T}{\partial x} + vA_y \frac{\partial K_T}{\partial y} + wA_z \frac{\partial k_T}{\partial z} \right) = P_T + G_T + D_{iff_{k_T}} - \varepsilon_T$$
  
Ecuación 1.254

donde,  $V_F$ ,  $A_x$ ,  $A_y$ , y  $A_z$  son las funciones *FAVOR* de FLOW-3D,  $P_T$  es la producción de energía cinética turbulenta:

$$P_{T} = CSPRO\left(\frac{\mu}{\rho V_{F}}\right) \left\{ 2A_{x} \left(\frac{\partial u}{\partial x}\right)^{2} + 2A_{y} \left(R\frac{\partial v}{\partial y} + \xi\frac{u}{x}\right)^{2} + 2A_{z} \left(\frac{\partial w}{\partial z}\right)^{2} + \left(\frac{\partial v}{\partial x} + R\frac{\partial u}{\partial y} - \xi\frac{v}{x}\right) \left[A_{x}\frac{\partial v}{\partial x} + A_{y} \left(R\frac{\partial u}{\partial y} - \xi\frac{v}{x}\right)\right] + \left(\frac{\partial u}{\partial z} + \frac{\partial w}{\partial x}\right) \left(A_{z}\frac{\partial u}{\partial z} + A_{x}\frac{\partial w}{\partial x}\right) + \left(\frac{\partial v}{\partial z} + R\frac{\partial w}{\partial y}\right) \left(A_{z}\frac{\partial v}{\partial z} + A_{y}R\frac{\partial w}{\partial y}\right) \right\}$$

$$Ecuación 1.255$$

donde

- *CSPRO* es un parámetro de turbulencia, cuyo valor predeterminado es 1
- R y ξ se describen en la sección Ecuación de continuidad de masa y están relacionados con el sistema de coordenadas cilíndricas (si se utiliza).

El plazo de producción de la flotabilidad es

$$G_{T} = -CRHO\left(\frac{\mu}{\rho^{3}}\right)\left(\frac{\partial\rho}{\partial x}\frac{\partial p}{\partial x} + R^{2}\frac{\partial\rho}{\partial y}\frac{\partial p}{\partial y} + \frac{\partial\rho}{\partial z}\frac{\partial p}{\partial z}\right)$$
  
Ecuación 1.256

donde

- μ es la viscosidad dinámica molecular,
- ρ es la densidad del fluido,
- P es la presión
- *CRHO* es otro parámetro de turbulencia, cuyo valor predeterminado es 0 pero para problemas de flujo de flotación térmica se debe elegir aproximadamente 2.5. El término de difusión es dónde:

$$D_{iff_{k_T}} = \frac{1}{V_F} \left[ \frac{\partial}{\partial x} \left( v_k A_x \frac{\partial k_T}{\partial x} \right) + R \frac{\partial}{\partial y} \left( v_k A_y R \frac{\partial k_T}{\partial y} \right) + \frac{\partial}{\partial z} \left( v_k A_z \frac{\partial k_T}{\partial z} \right) + \xi \frac{v_k A_x k_T}{x} \right]$$
  
Ecuación 1.257

donde  $v_k$  se encuentra el coeficiente de difusión y  $k_T$  se calcula en función del valor local de la viscosidad turbulenta. El parámetro *RMTKE* definido por el usuario es el multiplicador de viscosidad usado para calcular el coeficiente de difusión turbulento (su valor predeterminado es 1).

La tasa de disipación de energía turbulenta  $\varepsilon_T$  en el modelo de una ecuación está relacionada con la energía cinética turbulenta  $k_T$ 

$$\varepsilon_T = CNU \sqrt{\frac{3}{2}} \frac{k_T^{3/2}}{TLEN}$$

dónde:

- CNU es un parámetro (0.09 por defecto),
- $k_T$  es la energía cinética turbulenta
- *TLEN* es la escala de longitud turbulenta.

Por defecto, FLOW-3D elige un valor para *TLEN* que sea el 7% de la dimensión de dominio más pequeña; sin embargo, se recomienda que este valor sea el 7% del diámetro hidráulico [Fard-Boyaghchi-2007], que es una escala de longitud característica del flujo. En el flujo de la tubería, el diámetro hidráulico es igual al diámetro interior de la tubería. En flujos de corriente, es la profundidad de la corriente.

Un modelo más sofisticado y más utilizado consiste en dos ecuaciones de transporte para la energía cinética turbulenta  $k_T$  y su disipación  $\varepsilon_T$ , el llamado modelo  $k - \varepsilon$  [Harlow-Nakayama-1967], que elimina la necesidad de la Ecuación 1.258 (excepto en los límites de entrada y en las regiones de flujo con disipación cercana a cero  $\varepsilon_T$ ). Se ha demostrado que el modelo  $k - \varepsilon$  proporciona aproximaciones razonables a muchos tipos de flujos [Rodi-1980]. Se resuelve una ecuación de transporte adicional para la disipación turbulenta  $\varepsilon_T$ .

$$\frac{\partial \varepsilon_T}{\partial t} + \frac{1}{V_F} \left\{ uA_x \frac{\partial \varepsilon_T}{\partial x} + vA_y R \frac{\partial \varepsilon_T}{\partial y} + wA_c \frac{\partial \varepsilon_T}{\partial z} \right\} \\ = \frac{CDIS1 \ \varepsilon_T}{k_{T:}} \left( P_T + CDIS3 \ G_T \right) + D_{iff_{\xi}} - CDIS2 \ \frac{\varepsilon_T^2}{K_T} \\ Ecuación \ l.259$$

Aquí, *CDIS1*, *CDIS2* y *CDIS3* son todos parámetros sin dimensiones ajustables por el usuario, y tienen valores predeterminados de 1.44, 1.92 y 0.2, respectivamente, para el modelo  $k - \varepsilon$ . En la mayor parte del dominio de flujo, la Ecuación 1.259 reemplaza a la Ecuación 1.258 y, por lo tanto, reduce la necesidad de un valor especificado por el usuario de *TLEN* en todo el dominio.

La difusión de la disipación  $D_{iff_{\varepsilon}}$  es:

$$D_{iff_{\varepsilon}} = \frac{1}{V_{F}} \left\{ \frac{\partial}{\partial x} \left( v_{\varepsilon} A_{x} \frac{\partial \varepsilon_{T}}{\partial x} \right) + R \frac{\partial}{\partial y} \left( v_{\varepsilon} A_{y} R \frac{\partial \varepsilon_{T}}{\partial y} \right) + \frac{\partial}{\partial z} \left( v_{\varepsilon} A_{z} \frac{\partial \varepsilon_{T}}{\partial z} \right) + \varepsilon \frac{v_{\varepsilon} A_{x} \varepsilon_{T}}{x} \right\}$$
  
Ecuación 1.260

Otro modelo de turbulencia se basa en los métodos del Grupo de Renormalización (RNG) [Yakhot-Orszag-1986] [Yakhot-Smith-1992]. Este enfoque aplica métodos estadísticos a la derivación de las ecuaciones promediadas para cantidades de turbulencia, como la energía cinética turbulenta y su tasa de disipación.

El modelo RNG usa ecuaciones similares a las ecuaciones para el modelo  $k - \varepsilon$ . Sin embargo, las constantes de ecuación que se encuentran empíricamente en el modelo  $k - \varepsilon$  estándar se derivan explícitamente en el modelo RNG. En general, el modelo RNG tiene una aplicabilidad más amplia que el modelo estándar  $k - \varepsilon$ . En particular, se sabe que el modelo RNG describe flujos de turbulencia de baja intensidad y flujos que tienen regiones de corte fuerte con mayor precisión. Además, los valores predeterminados de *RMTKE*, *CDIS*1 y *CNU* son diferentes a los utilizados en el modelo  $k - \varepsilon$ , son 1.39, 1.42 y 0.085, respectivamente. *CDIS*2 se calcula a partir de los términos de energía cinética turbulenta  $k_T$  y producción turbulenta  $P_T$ .

En todos los modelos de transporte de turbulencia, la viscosidad turbulenta cinemática se calcula a partir de

$$v_T = CNU \frac{k_T^2}{\varepsilon_T}$$

Ecuación 1.261

donde  $v_T$  es la viscosidad cinemática turbulenta.

Un desafío numérico particular de los modelos de dos ecuaciones  $k - \varepsilon$  y RNG es la necesidad de limitar el valor  $\varepsilon_T$  desde abajo. La Ecuación 1.259 podría producir valores  $\varepsilon_T$  muy cercanos a cero, y aunque  $k_T$  físicamente también debería acercarse a cero en tales casos, puede no hacerlo por razones numéricas, lo que resulta en valores no físicos de  $v_T$  en la Ecuación 1.259. Para solucionar este problema, se limita el valor de  $\varepsilon_T$  tal que no pueda caer por debajo de

$$\varepsilon_{T,min} = CNU \sqrt{\frac{3}{2}} \frac{k_T^{3/2}}{TLEN}$$

Ecuación 1.262

donde *TLEN* es la escala de longitud máxima turbulenta. Esto puede ser definido por el usuario o la escala de longitud turbulenta se puede limitar automáticamente.

El objetivo principal de cualquier modelo de turbulencia es proporcionar un mecanismo para estimar la influencia de las fluctuaciones turbulentas en las cantidades de flujo promedio. Esta influencia generalmente se expresa mediante términos de difusión adicionales en las ecuaciones para la masa media, el momento y el transporte de energía, las ecuaciones. Ecuación 1.1, Ecuación 1.9 y Ecuación 1.21. Debido a que la turbulencia aumenta la difusión del impulso, mejora efectivamente la viscosidad. Donde sea que aparezca el coeficiente de viscosidad dinámica en las ecuaciones, se asume que es una suma de las viscosidades moleculares y turbulentas.

$$\mu = \rho(\upsilon + \upsilon_T)$$

Ecuación 1.263

Estrictamente hablando, esto no siempre es correcto, pero es una buena aproximación para altos niveles de turbulencia, es decir, cuando la viscosidad turbulenta

es mucho mayor que el valor molecular. En niveles bajos de turbulencia, el modelo  $k - \varepsilon$  no es correcto sin modificaciones adicionales.

#### Escalas turbulentas

Las escalas turbulentas de tiempo y longitud se pueden formar a partir de la energía cinética turbulenta y la disipación

$$T_{T} = \frac{k_{T}}{\varepsilon_{T}}$$
Ecuación 1.264
$$L_{T} = \frac{k_{T}^{3/2}}{\varepsilon_{T}}$$
Ecuación 1.265

En la ecuación para  $\varepsilon_T$  así como la viscosidad turbulenta, el término  $k_T/\varepsilon_T$  es reemplazado por la escala de tiempo turbulento.

En FLOW-3D, *TLEN* es un parámetro definido por el usuario que representa una estimación de la escala de longitud turbulenta real para el modelo de una ecuación, y un valor máximo de la escala de longitud para los modelos de dos ecuaciones. Además, esta escala de longitud máxima turbulenta se puede calcular automáticamente en función del espacio y el tiempo durante la simulación.

Cuando se selecciona el cálculo dinámico, el modelo calcula las escalas de tiempo y longitud turbulentas delimitadas. La escala de tiempo turbulenta acotada es

$$\begin{split} \tilde{T}_{T} &= max \left[ T_{T}^{low}, min \left( T_{T}^{up}, \frac{k_{T}}{\varepsilon_{T}} \right) \right] \\ \tilde{L}_{T} &= max \left[ L_{T}^{low}, min \left( L_{T}^{up}, \frac{k_{T}^{3/2}}{\varepsilon_{T}} \right) \right] \end{split}$$
Ecuación 1.266

,

Ecuación 1.267

Estos limitadores se originan en las escalas de Kolmogorov [Pope-2000] en el límite inferior y la teoría de distorsión rápida en el límite superior [Kato-Launder-1993], [Durbin-1996].

### • Modelo de longitud de mezcla Prandtl

El modelo más simple, el modelo de longitud de mezcla Prandtl, asume que la viscosidad del fluido se ve incrementada por procesos de mezcla turbulentos en regiones

de alto cizallamiento, por ejemplo, cerca de límites sólidos. Sin embargo, esto solo es realmente adecuado para flujos completamente desarrollados, casi constantes. De manera más general, es necesario tener en cuenta algunos procesos de transporte (es decir, convección y difusión) para emular mejor las distribuciones espaciales y temporales de la intensidad de la turbulencia. El modelo de longitud de mezcla de Prandtl supone que la producción y la disipación de la turbulencia están en equilibrio en todo el flujo:

$$P_T + G_T = \varepsilon_T$$
  
Ecuación 1.268

donde

- $P_T$  y  $G_T$  son las producciones de turbulencia debidas a los efectos de cortadura y flotabilidad, respectivamente
- $\varepsilon_T$  es la disipación de la turbulencia
- $P_T$  y  $G_T$  se definen como antes. En otras palabras, se descuidan la suspensión, la difusión y la tasa de tiempo de cambio de la energía turbulenta. La disipación de la turbulencia también se puede escribir como

$$\varepsilon_T = CNU \sqrt{\frac{3}{2}} \frac{k_T^{3/2}}{TLEN}$$

Ecuación 1.269

donde *CNU* es un parámetro (0.09 por defecto). Combinando Ecuación 1.269 y Ecuación 1.268,  $k_T$  se calcula en términos de *TLEN*, las tasas locales de corte y los gradientes de presión / densidad. Luego  $k_T$  y *TLEN* se puede utilizar para calcular la viscosidad cinemática turbulenta  $v_T$  de

$$v_T = TLEN \sqrt{\frac{2k_T}{3}}$$

Ecuación 1.270

Se ha demostrado que este procedimiento produce un resultado que es una generalización del modelo original de longitud de mezcla Prandtl [Rodi-1980]. Debido a sus supuestos restrictivos, este modelo es menos útil que los modelos de transporte de turbulencia de una y dos ecuaciones.

### Modeo de simulación de Large Eddy

El modelo de turbulencia de Large Eddy Simulation (LES) surgió de los esfuerzos de modelado atmosférico. La idea básica es que uno debe calcular directamente todas las estructuras de flujo turbulento que pueden resolverse mediante la cuadrícula computacional y solo aproximar aquellas características que son demasiado pequeñas para ser resueltas [Smagorinsky-1963]. Cuando se utiliza el modelo LES, es importante recordar que el modelo es inherentemente tridimensional y depende del tiempo. Además,

las fluctuaciones deben inicializarse o introducirse en los límites de entrada. Aunque esto requiere más esfuerzo, y los cálculos pueden ser intensivos en la CPU debido a las mallas más finas de lo que se requeriría, los resultados de LES a menudo proporcionan más información que la producida por los modelos basados en el promedio de Reynolds (es decir, los modelos mencionados anteriormente). Por ejemplo, cuando los modelos LES se utilizan para calcular el flujo turbulento alrededor de grandes edificios, no solo se obtienen las tensiones del viento, sino también una estimación de la magnitud y la desviación estándar de las fluctuaciones de la fuerza asociadas con el flujo turbulento.

En el modelo LES, los efectos de la turbulencia demasiado pequeños para calcularse están representados por una viscosidad de Foucault, que es proporcional a una escala de longitud por una medida de las fluctuaciones de velocidad en esa escala. Para la escala de longitud, [Smagorinsky-1963] utiliza una media geométrica de las dimensiones de la celda de la cuadrícula,

$$L = \left(\delta x \delta y \delta z\right)^{1/3}$$

Ecuación 1.271

Y la escala las fluctuaciones de velocidad por la magnitud L veces representa el esfuerzo cortante medio. Estas cantidades se combinan en la viscosidad del remolino cinemático LES,

$$v_T = (cL)^2 \sqrt{2e_{ij} 2e_{ij}}$$
  
Ecuación 1.272

donde *c* es una constante que tiene un valor típico en el rango de 0.1 a 0.2 y  $e_{ij}$  son los componentes del tensor de velocidad de deformación. Esta viscosidad parásita cinemática se incorpora a la viscosidad dinámica utilizada en FLOW-3D exactamente de la misma manera que para los modelos de transporte de turbulencia Ecuación 1.263.

$$\mu = \rho(\upsilon + \upsilon_T)$$
Ecuación 1.273

### o Condiciones de frontera de turbulencia

Las Ecuación 1.253 y Ecuación 1.259 constituyen los modelos de turbulencia de dos ecuaciones utilizados en FLOW-3D. Las condiciones de contorno para estas ecuaciones están parcialmente integradas en las ecuaciones a través de las áreas fraccionarias. Por ejemplo, todos los flujos en suspensión y difusores son automáticamente cero en las paredes rígidas donde se desvanecen las áreas fraccionarias abiertas. En las superficies libres, las tensiones tangenciales son cero debido a los derivados de la velocidad de desvanecimiento en toda la superficie.

En los límites de entrada, el usuario puede especificar la energía cinética turbulenta y la disipación directamente. Si se proporciona un valor para la energía cinética

turbulenta, pero no la disipación, entonces se calculará automáticamente un valor para la disipación en función del valor de *TLEN*.

Las tensiones tangenciales evaluadas en los límites de las paredes también son cero debido a las áreas de flujo cero. Sin embargo, debería haber contribuciones a las ecuaciones  $k_T$  y  $\varepsilon_T$  de transporte y derivadas de las tensiones de corte tangencial de la pared. Estas tensiones se producen en las subcapas laminares y son proporcionales a los gradientes de viscosidad molecular y velocidad local. Por lo tanto, podríamos incorporar contribuciones de tensión de cortadura de la pared en el término de  $P_T$ . Desafortunadamente, este enfoque no siempre parece funcionar bien. No limita adecuadamente los valores de  $k_T$  y  $\varepsilon_T$  cerca de los límites. Por lo tanto, se sigue el procedimiento más estándar (por ejemplo, Referencia [Rodi-1980]) en el cual  $k_T$  y  $\varepsilon_T$  se especifican en ubicaciones de malla adyacentes a los límites de la pared.

Debido a que el método FAVOR cuenta con límites de muro que pueden pasar a través de una celda de malla en cualquier ángulo, el cálculo de los valores límite adecuados para  $k_T$  y  $\varepsilon_T$  se ha generalizado más allá de una simple evaluación de borde de celda.

En FLOW-3D, los valores se asignan a  $k_T$  y  $\varepsilon_T$  en cada celda de malla que tiene una o más de sus caras parcialmente bloqueadas o totalmente bloqueadas por una pared rígida. Para determinar los valores límite para  $k_T$  y  $\varepsilon_T$  el procedimiento habitual asume un equilibrio local entre la producción de cortadura turbulento y los procesos de descomposición, y un perfil de velocidad de la ley de la pared [Rodi-1980]. Combinado con la definición de la viscosidad turbulenta, la Ecuación 1.267 lleva a los valores.

$$k_T = rac{u_*^2}{\sqrt{CNU}}$$
 y  $arepsilon_T = rac{u_*^3}{kd}$ 

Ecuación 1.274

donde  $u_*$  determina la velocidad de corte local a partir de la ecuación

$$u = u_* \left[ \frac{1}{k} ln \left( \frac{\rho u_* d}{\mu} \right) + 5.0 \right]$$

Ecuación 1.275

y u es la componente paralela de la velocidad calculada adyacente a la pared. La distancia normal de la velocidad calculada desde la pared se denota con d y k es la constante de von Karman.

Como el método FAVOR no localiza con precisión las ubicaciones de las paredes dentro de una celda, se deben introducir aproximaciones para encontrar u,  $u^*$  y d. Para este propósito, primero determinamos la dirección de la pared normal en la celda, donde se puede calcular u como el componente de la velocidad centrada en la celda que es paralela a la pared. La distancia promedio a la pared d, se estima que es la mitad del ancho de la celda en la dirección normal de la pared. Es decir, el triplete ( $\delta_x$ ,  $\delta_y$ ,  $\delta_z$ ) se trata como un vector cuyo producto interno con la pared normal se define como el ancho de la celda en la dirección normal. Finalmente,  $u^*$  se calcula iterativamente a partir de la Ecuación 1.246 en términos de u y d. Si hay una fuente de masa en la superficie de la pared, entonces agregamos a  $u^*$  un término igual a u veces la velocidad de inyección normal efectiva de la masa. Esto explica aproximadamente la tensión de corte adicional inducida por la inyección de masa. Una vez que se han computado estas cantidades, la Ecuación 1.273 se usa para especificar los valores centrados en celdas de  $k_T$  y  $\varepsilon_T$  que representan las condiciones de contorno deseadas.

### z. TRANSFERENCIA DE CALOR DE LA PARED

Para los cálculos realizados con la opción de ecuación de transporte de energía, FLOW-3D permite la transferencia de calor entre el fluido y el material estructural llamado estructura de calor. Los cálculos de fluidos pueden ser totalmente compresibles, casi incompresibles o incompresibles. Las estructuras de calor pueden ser obstáculos internos o paredes en los límites de la malla computacional. También se permite la transferencia de calor a través de deflectores bidimensionales.

El modelo de transferencia de calor tiene numerosas opciones destinadas a proporcionar flexibilidad para el usuario. Los flujos pueden o no, estar dominados por las fuerzas de flotación generadas por la transferencia de calor. FLOW-3D calcula la transferencia de calor desde los límites que tienen una temperatura conocida, un flujo de calor específico o una fuente de energía interna específica. Se pueden incluir múltiples estructuras, cada una con un modelo independiente de temperatura / flujo de calor / fuente de energía.

Para problemas de dos fluidos, las ecuaciones de energía interna de la mezcla, Ecuación 1.21 y Ecuación 1.23, se usan para que se agregue un término de fuente (o sumidero) a la energía de la mezcla. Este término se evalúa a partir de la transferencia de calor entre el fluido y las paredes como se describe a continuación. La fuente se divide entre los dos fluidos de tal manera que se asegure la misma temperatura del fluido.

### o Términos de la fuente de energía

La evaluación del término fuente de energía debe considerar múltiples estructuras. En cualquier celda de malla computacional puede haber más de una estructura, en cuyo caso la fuente debe ser la suma de las contribuciones individuales. Cada contribución está determinada por las opciones especificadas para esa estructura. El usuario puede especificar directamente el término fuente como una energía dependiente del tiempo por unidad de tiempo (potencia) o puede calcularse a partir de la estructura térmica y las temperaturas del fluido.

Los caudales de flujo de calor netos especificados para una estructura se convierten en caudales de flujo de calor locales asumiendo un flujo de calor uniforme sobre la superficie de la estructura. Opcionalmente, el flujo de calor puede ser uniforme en el área húmeda de la estructura de calor. Esto resulta en una tasa de fuente de energía para una celda de malla computacional de la forma

$$q = \frac{W_A Q_T}{A_T}$$

Donde

- $W_A$ ,  $Q_T$  y  $A_T$  se refieren a la estructura de calor en consideración y representan el área de superficie dentro de la celda, la tasa de flujo de calor de la estructura total y el área de superficie de la estructura total, respectivamente
- $Q_T$  puede ser especificado por el usuario como una cantidad dependiente del tiempo

Si se conoce la temperatura de la pared de una estructura térmica (ya sea como un valor especificado o calculado), FLOW-3D evalúa la velocidad de la fuente de energía local como

$$q = hW_A(T_w - T)$$

Ecuación 1.277

donde el coeficiente de transferencia de calor al fluido h, puede ser especificado por el usuario o evaluado a partir de funciones de correlación basadas en condiciones locales, como se describe a continuación. En la Ecuación 1.277, T es la temperatura de la superficie del fluido,  $W_A$  es el área de la superficie de la estructura térmica, y  $T_w$  es la temperatura de la superficie de la estructura térmica (es decir, el obstáculo o la pared).

La temperatura de la superficie de la estructura térmica  $T_w$ , puede ser una cantidad especificada en función del tiempo, calculada dinámicamente a partir de la ecuación de conducción (como se describe en Procesos de difusión) o evaluada a partir de la expresión de parámetros agrupados

$$M_w C_W \frac{dT_w}{dt} = POW - \sum q$$

Ecuación 1.278

donde la suma se lleva a cabo sobre todas las celdas conectadas a la estructura POWy es una potencia específica dependiente del tiempo para la estructura, y  $M_w C_W$  es la capacidad de calor total (masa específica por calor específico) de la estructura. Los términos de la fuente de energía q se calculan a partir de la *Ecuación 1.277*.

# Evaluación de la superficie de área

El área de superficie de calor en cada celda de malla de fluido se evalúa automáticamente mediante FLOW-3D a partir de la geometría de la estructura de calor. Sin embargo, una rugosidad de la superficie proporcionada por el usuario puede usarse como un factor multiplicativo en el área geométrica para aumentar o disminuir la tasa efectiva de transferencia de calor. Especificar una rugosidad cero, por ejemplo, elimina el cálculo de la estructura de calor por completo, lo que es útil para un límite adiabático. *ROBS* se utiliza para definir la rugosidad de la superficie del obstáculo y *RWALL* para los límites de la malla de la pared. Se puede usar una variable de rugosidad separada *ROUGH* para definir la rugosidad por fricción.

El área de superficie geométrica correcta en una celda de malla se calcula fácilmente en un límite de malla, ya que este límite necesariamente cae en un plano de coordenadas de malla. Los límites de los obstáculos, por otro lado, pueden atravesar celdas de malla. En este caso, el área de superficie se estima asumiendo que la superficie es localmente plana. Esto también es consistente con el cálculo de fracciones de área y volumen dentro de FLOW-3D. El resultado se multiplica por la rugosidad para obtener el área real utilizada en los cálculos posteriores.

El área de superficie total de una estructura térmica se evalúa sumando todas las áreas de superficie de celdas de malla. Debido a la resolución finita, el valor calculado puede no ser igual al área de superficie geométrica exacta del obstáculo. FLOW-3D permite al usuario volver a normalizar las áreas calculadas especificando áreas totales conocidas a través de la entrada. Esto asegura el área de superficie total correcta en los casos en que se espera que el área total sea una consideración importante para obtener resultados precisos.

### o Coeficiente de Transferencia de Calor Fluido / Obstáculo

Se debe tener cuidado para resolver las áreas donde las variables de flujo tienen gradientes pronunciados. Las superficies de discontinuidad y los límites internos representan tales áreas. El método VOF, por ejemplo, permite resolver un límite de superficie libre dentro de una celda de malla computacional y establecer condiciones de límite en la celda según la cantidad de fluido en ella y la orientación de la superficie [Hirt-Nichols-1981]. Otro ejemplo es el uso del método FAVOR para describir las superficies de obstáculos dentro de las celdas de malla [Hirt-Sicilian-1985]. El método FAVOR también se utiliza en FLOW-3D para calcular los flujos de calor interfacial fluido / obstáculo.

Las temperaturas centradas en las células representan el contenido promedio de volumen de control y el contenido de calor del obstáculo y pueden ser sustancialmente diferentes de las temperaturas interfaciales utilizadas en la Ecuación 1.277. Por lo tanto, el uso de temperaturas centradas en las células para calcular el flujo interfacial no sería correcto. En FLOW-3D, se emplea una interpolación lineal de la temperatura entre un nodo de celda y la ubicación de la interfaz metal / molde para obtener temperaturas de metal y molde en la interfaz [Goldstein-1950]. Estas temperaturas se utilizan para calcular el flujo de calor en la interfaz, Ecuación 1.277. La ubicación y orientación aproximadas de la interfaz pueden evaluarse a partir de fracciones fraccionadas de área y volumen.

Las temperaturas interfaciales se obtienen al asumir un perfil lineal de la temperatura entre la interfaz y el nodo celular más cercano en la dirección normal a la

interfaz. Este procedimiento produce un coeficiente de transferencia de calor efectivo  $h_{eff}$  entre dos nodos de temperatura en cada lado de la interfaz,

$$h_{eff} = \frac{h\frac{k_1k_2}{a_1a_2}}{h\left(\frac{k_1}{a_1} + \frac{k_2}{a_2}\right) + \frac{k_1k_2}{a_1a_2}}$$

Ecuación 1.279

donde

- 1/h es la resistencia térmica de la interfaz (definida por el usuario),
- $k_1$  y  $k_2$  son coeficientes de conducción térmica de fluidos y obstáculos
- $a_1 y a_2$  son distancias a la interfaz desde los nodos celulares más cercanos en el fluido y el obstáculo, respectivamente

La Ecuación 1.277 implica que la transferencia de calor neta está limitada por la menor de las resistencias térmicas del fluido, el obstáculo y la interfaz. Los términos conductivos en las ecuaciones de energía de fluidos y obstáculos también se modifican en las células interfaciales para tener en cuenta con mayor precisión los gradientes de temperatura en las células parcialmente bloqueadas. En problemas de dos fluidos, el coeficiente de transferencia de calor de la mezcla se calcula como un promedio ponderado con respecto a la fracción de volumen local de cada fluido.

$$h_{eff} = F h_{eff1} + (1 - F) h_{eff2}$$

Ecuación 1.280

donde F se encuentra la fracción de fluido y  $h_{eff1}$  y  $h_{eff2}$  se calculan de acuerdo con la Ecuación 1.279 en el que h se sustituye por el coeficiente de transferencia de calor para los fluidos uno y dos, respectivamente.

Si el usuario no proporciona ningún coeficiente de transferencia de calor, FLOW-3D lo evalúa utilizando expresiones analíticas o empíricas simples para el flujo sobre una placa plana. Las condiciones de flujo cerca de una pared en cada volumen de control se correlacionan con una de las siguientes situaciones físicas: convección natural, convección forzada laminar y turbulenta, y conducción dentro del fluido. El coeficiente de transferencia de calor se deriva entonces en función de la situación más cercana. Es importante comprender que el valor h resultante de cada volumen de control refleja las condiciones de transferencia de calor en la capa de fluido entre la pared y el centro del volumen abierto de la celda. Se supone que la resistencia térmica real del interfaz fluido / obstáculo es cero.

De la discusión en esta sección, parece que el coeficiente de transferencia de calor siempre se ajusta en cada volumen de control, independientemente de si está definido explícitamente por el usuario o se deja al valor predeterminado. En caso de que se deba utilizar un valor de coeficiente de transferencia de calor específico entre los nodos de temperatura del fluido y el obstáculo, sin ningún ajuste adicional, el usuario debe definir un coeficiente de transferencia de calor positivo y un valor positivo de la variable de escala de longitud de obstáculo *OBSL*. La resistencia térmica de la interfaz de contacto entre dos materiales, es decir, entre el fluido y la pared, representado en la Ecuación 1.281 por el coeficiente de transferencia de calor h, es en gran medida una función de las propiedades de la superficie de los dos materiales, como la rugosidad, y el tamaño de la brecha entre ellos. En aplicaciones de fundición también puede ser una función de la temperatura y la fracción sólida. En FLOW-3D, este último se explica a través de una relación lineal entre el coeficiente de transferencia de calor y la fracción sólida  $F_s$ 

$$h = F_s HOBS1S(n) + (1 - F_s) HOBS1(n)$$
  
Ecuación 1.281

donde

- *HOBS*1 (n) es el coeficiente de transferencia de calor definido por el usuario en el metal líquido,
- *n* es el número de componente descrito por estos coeficientes

Normalmente, *HOBS1S* (n) es mucho más pequeño que *HOBS1* (n) debido a un mejor contacto que los materiales líquidos hacen con las paredes que los sólidos.

#### o Transferencia de calor en deflector

La transferencia de calor a través de los deflectores es bastante diferente de la de las estructuras de calor. Como los deflectores se tratan como si no tuvieran grosor y, por consiguiente, no tengan capacidad de calor, la tasa de transferencia de calor depende solo de las temperaturas instantáneas del fluido en ambos lados del deflector.

Supongamos que una cara de un deflector con porosidad PBAF separa las células de fluido N y M. La tasa de fuente de energía (sumidero) en la celda de fluido M se evalúa como

$$q_M = (1 - PBAF) \ HBFT \ (T_N - T_M)$$
  
Ecuación 1.282

El coeficiente de transferencia de calor efectivo *HBFT* es aproximado por un análogo de resistencia eléctrica como

$$HBFT = \frac{2H_NH_M}{H_N + H_M}$$

Ecuación 1.283

donde  $H_N$ , por ejemplo, es el promedio ponderado por volumen de dos fluidos para la celda N,

$$H_N = (1 - F_N) HBAF2 + F_N HBAF1$$

Ecuación 1.284

y donde *HBAF2* y *HBAF1* son coeficientes de transferencia de calor suministrados por el usuario. Estos coeficientes deben tener en cuenta las pérdidas de conducción de calor, así como la convección. Si ambos son cero, no se transfiere calor a través del deflector.

# o Transferencia de calor a regiones vacías

El fluido y los obstáculos transfieren calor a las regiones vacías de acuerdo con

$$q_V = h_V W_V (T_V - T)$$

Ecuación 1.285

donde

- $h_V$  es un coeficiente de transferencia de calor (constante),
- $W_V$  es el área de superficie de transferencia de calor
- $T_V$  la temperatura de la región vacía
- *T* Es la temperatura del fluido u obstáculo. Cada vacío puede tener una temperatura diferente pero constante.

Los coeficientes de transferencia de calor pueden establecerse para la transferencia de calor fluido / vacío asociada con las pérdidas de calor tanto por convección como por radiación. De manera similar, se pueden establecer dos coeficientes de transferencia de calor para la transferencia de calor de vacío / obstáculo. Se puede establecer otro coeficiente de transferencia de calor para el intercambio de calor entre un fluido y un vacío separados por un deflector. La radiación se modela solo computando como una emisividad proporcional a las diferencias en la cuarta potencia de la temperatura del cuerpo que irradia y la temperatura del vacío. Este modelo asume que las temperaturas están en grados Kelvin.

# o Transferencia de calor a los canales de refrigeración

FLOW-3D modela canales de enfriamiento como regiones especiales. El flujo de fluido en el canal no se modela explícitamente, sino que la influencia física se modela aproximadamente utilizando el coeficiente de transferencia de calor y la temperatura de la superficie radiante. Los obstáculos transfieren calor a los canales de refrigeración de acuerdo con

$$q_{cc} = h_{cc} W_{cc} (T_{cc} - T)$$

Ecuación 1.286

donde

- $q_{cc}$  es el coeficiente de transferencia de calor
- $W_{cc}$  es el área de superficie de transferencia de calor
- $T_{cc}$  la temperatura del canal de refrigeración
- *T* es la temperatura del obstáculo