

MODELADO DE LAS FUERZAS DE ARRASTRE SOBRE UNA PARTÍCULA ESFÉRICA FRENTE A INTERFASES DE SOLIDIFICACIÓN CÓNCAVAS

MODELLING THE INTERACTION OF PARTICLES WITH CONCAVE SOLIDIFYING INTERFACE

E.M. Agaliotis^{1,2*}, M.R. Rosenberger², A.E. Ares^{1,2} y C.E. Schvezov^{1,2}

¹CONICET (Consejo Nacional de Investigaciones Científicas y Técnicas)
Rivadavia 1917, (1033) Buenos Aires, Argentina

²Programa de Materiales, Modelización y Metrología
Universidad Nacional de Misiones

Azara 1552, (3300) Posadas. Misiones. Argentina

e-mail: eliana@fceqyn.unam.edu.ar, schvezov@fceqyn.unam.edu.ar

La distribución de las partículas en materiales obtenidos por solidificación está condicionada por la interacción entre ellas y con la interfase de solidificación, obteniéndose diferentes propiedades mecánicas y fisico-químicas. Se modeló y simuló la interacción entre una interfase de solidificación y una partícula esférica, inmersa en el material fundido, teniendo en cuenta que este fenómeno está regido por un equilibrio dinámico entre fuerzas de arrastre y repulsión que se manifiestan sobre la partícula. El modelo incluye dos fuerzas una de arrastre y otra de repulsión, calculadas por separado luego combinadas para obtener el valor de equilibrio. Utilizando dinámica de fluidos computacional se calculó la fuerza de arrastre sobre la partícula en función de la velocidad de solidificación, el radio de la partícula y la separación partícula-interfase. La fuerza de repulsión se calculó utilizando la ecuación de Lifshitz van der Waals integrando numéricamente según la forma y separación de la interfase. Se compararon las fuerzas de arrastre obtenidas con una interfase plana y con una interfase cóncava, ésta última fue calculada a partir de simulaciones del campo térmico. Los resultados muestran que una interfase cóncava genera mayores fuerzas de arrastre que una interfase plana a una misma separación de interfase. Esto hace que la velocidad crítica sea menor que la correspondiente para una interfase plana y un mismo radio de partícula.

Palabras Claves: elementos finitos, solidificación, materiales compuestos, interacción sólido-fluido, modelización.

The pushing of particles by a solidifying interface is a phenomenon that generally occurs during solidification of a melt containing foreign or native particles. As a result, the particles could be segregated and affect the expected properties of the material. The interaction of a foreign particle with a solidifying interface is studied with numerical modelling. The model includes two main forces; the drag and the pushing forces. The drag force is calculated from the fluid flow, the repulsion force by the Lifshitz-Van der Waal model. The thermal field is decoupled from the force field. The model is applied to a metallic matrix and particles with similar and higher thermal conductivities; giving planar and concave interface shapes respectively. The steady state of pushing is studied for the same conditions and different solidification velocities and particle radius. The results show that a concave interface shape generates higher drag forces about one order the magnitude higher than those for a planar interface at the same separation. As a result the critical velocity is less than that corresponding to a planar interface.

Key Word: Computer simulation of solidification, Melt growth, Pushing.

I. INTRODUCCIÓN

La interacción entre partículas en un material fundido y un frente de solidificación es un fenómeno que puede afectar la distribución de las partículas en el material solidificado. Un tipo de interacción posible es la repulsión de las partículas, y como consecuencia la

segregación de las mismas, lo que afecta las propiedades finales del material.

En el caso de un estado estacionario de repulsión, como se muestra en la Fig. 1, existen dos fuerzas principales, la de arrastre (F_a) y la de repulsión (F_r) que se encuentran en equilibrio.

* Contacto: Tel: +54 3752 427491 int 153; Fax: +54 3752 425414; email: eliana@fceqyn.unam.edu.ar.

Este fenómeno ha sido estudiado por diversos autores ⁽¹⁻⁵⁾, con modelos experimentales y matemáticos. Los experimentos muestran que existe una velocidad crítica por encima de la cual no se produce la repulsión estacionaria y la partícula es atrapada en el sólido. Esta velocidad crítica disminuye con el aumento del tamaño de la partícula. El fenómeno depende de las propiedades, la naturaleza y la morfología de la partícula, el fundido, el sólido y los campos externos ⁽⁶⁻⁹⁾. Así, cuando la conductividad térmica de la partícula es diferente que la del medio, se altera la forma de la interfase en proximidades de la partícula ⁽¹⁰⁻¹⁵⁾.

En el siguiente trabajo se aborda el caso de una partícula conductora y una interfase cóncava ⁽¹⁶⁾. Los resultados presentados incluyen el efecto de la conductividad térmica en la configuración geométrica partícula-fundido-sólido que generan una interfase no plana y condiciones más extremas para el estado estacionario de repulsión y, por lo tanto, de la velocidad crítica.

II. MÉTODOS

Descripción del modelo

El problema físico está constituido por una partícula esférica de radio R inmersa en la matriz de un fluido que está solidificándose.

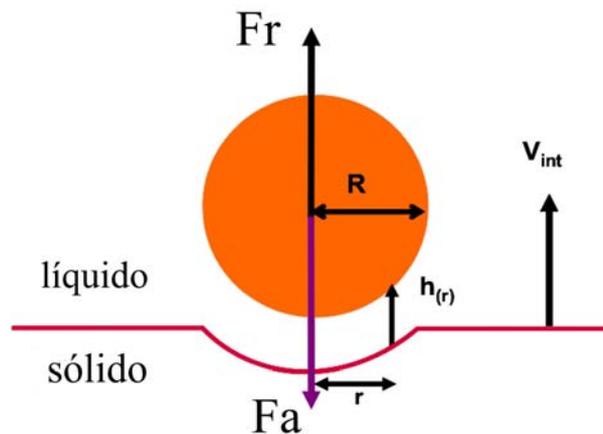


Figura 1. Esquema del sistema de repulsión en estado estacionario. Donde R =radio de partícula, V_{int} = velocidad de la interfase, F_r = fuerzas de repulsión, F_a =fuerzas de arrastre, $h(r)$ =distancia partícula interfase.

A pequeñas distancias los campos más afectados por la presencia de la partícula: son el campo de flujo de fluidos y el campo térmico.

En el modelo de repulsión intervienen fuerzas de repulsión y fuerzas de arrastre. Las fuerzas de repulsión ocasionan el movimiento de la partícula delante de la interfase, y como consecuencia, la generación de fuerzas de arrastre debidas al flujo de fluido que tienden a acercar la partícula hacia la interfase. En el estado estacionario de repulsión se establece un equilibrio entre estas fuerzas. Las fuerzas de repulsión consideradas son del tipo de Casimir-Lifshitz-Van der Waals ⁽¹⁵⁾ y las de arrastre son debidas a la viscosidad

del fluido y calculadas con las ecuaciones de Navier-Stokes ⁽²⁾. La fuerza de gravedad se considera despreciable frente a estas fuerzas.

El campo térmico está determinado por las conductividades térmicas de la partícula, el líquido y el sólido, modificando la forma de la interfase en las cercanías a la partícula.

Para un tratamiento más simple del problema se desacoplaron los campos térmicos y de fluidos de la siguiente manera: primero se calculó, mediante la simulación del campo térmico, la forma de la interfase a diferentes separaciones partícula-interfase, con un rango de separaciones comprendido entre; $2R$ y 7.10^{-8} m, como se muestra en la Fig. 2. Luego, a partir de cada una de las interfaces calculadas se construyó un modelo para calcular el flujo de fluidos alrededor de la partícula, en el rango de velocidades comprendido entre 6.10^{-8} m/s y 8.10^{-4} m/s, el cual abarca las velocidades de interfase típicos en la solidificación de metales y donde se podría encontrar una partícula en estado estacionario de repulsión. La fuerza de arrastre sobre la partícula fue calculada y representada en función de la velocidad. En tercer lugar, se calculó a partir de cada una de las interfaces, obtenidas del modelo térmico, la fuerza de repulsión según el modelo de Casimir-Lifshitz-Van der Waals.

Una vez calculadas las F_a y F_r , en la forma descrita, se calcula el punto de equilibrio para cada una de las interfaces obtenidas del modelo térmico. Por lo tanto, se obtiene una relación entre la separación partícula-interfase y la velocidad de interfase en la situación de estado estacionario de repulsión.

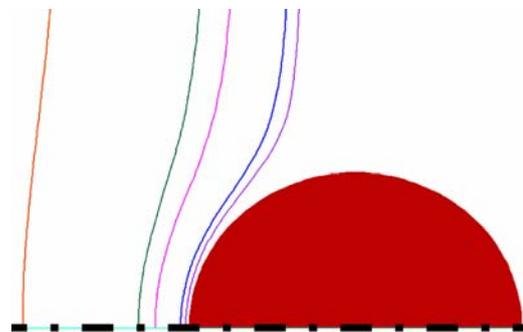


Figura 2. Forma de la interfase según diferentes separaciones partícula-interfase

El modelo térmico

En el modelo térmico, se considera solamente la transferencia de calor por conducción, unidireccional en el sentido de avance de la interfase. La simulación, mediante elementos finitos es realizada en un modelo de simetría axial. Se consideran las propiedades independientes de la temperatura, donde la partícula es mejor conductora del calor que la matriz.

Una malla estática de 50000 elementos con funciones de interpolación de primer orden en la temperatura son consideradas. Se refinó el modelo en las cercanías de la partícula para mejor detalle de la curvatura de la interfase. Sucesivos decrementos de los

valores de pasos del tiempo fueron utilizados para obtener una buena delineación de la forma y posición de la interfase, especialmente en las situaciones donde ésta se posiciona a distancias menores a 10^{-7} m de la partícula, reduciéndose el paso del tiempo hasta valores de $5 \cdot 10^{-6}$ segundos. El método implícito de Cranck-Nicholson fue utilizado en las simulaciones.

El modelo de flujo de fluidos

Las fuerzas de arrastre se calculan a partir del campo de velocidades del fluido alrededor de la partícula, determinado mediante el método de elementos finitos.

Se utilizan las ecuaciones de balance de masa y momento para el análisis. El fluido se considera Newtoniano y en flujo laminar, ya que el número de Reynolds (Re) respecto al diámetro de la partícula es del orden de 10^{-6} y aún menor.

En vista de la simetría se emplea un modelo de simetría axial. En la discretización del dominio se empleó una malla no estructurada estática de elementos cuadriláteros, con funciones de interpolación de 2do orden para la velocidad y de 1er orden para la presión, por lo tanto, se utilizó el método de Galerkin. La resolución del sistema de ecuaciones fue a través del método de Picard. En la interfase se impuso una velocidad de fluido constante paralela al eje de simetría.

El modelo de fuerzas de repulsión

La fuerza de repulsión para cada una de las interfases obtenidas del modelo térmico se calcula integrando la ecuación de Casimir-Lifshitz-van der Waals (eq. 1):

$$F_P = 2\pi B_3 \int_0^R \frac{r dr}{h^3(r)} \quad (1)$$

Donde B_3 es la constante de Casimir-Lifshitz-van der Waals, para éste material igual a $1 \cdot 10^{-20}$ J.

Para una interfase plana la expresión resulta en:

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

III. RESULTADOS Y DISCUSIÓN

Modelo térmico

El dominio esta constituido por una partícula esférica de radio $R=50$ micrones, con una conductividad térmica k_p , inmersa en un líquido, con conductividad térmica k_m . La relación entre las conductividades térmicas es k_p/k_m igual a 10, representativa del sistema plomo-cobre. Se emplean la ecuación de balance de calor para el análisis.

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

Los resultados del modelo térmico muestran que la interfase es plana cuando la misma se encuentra muy

separada de la partícula y gradualmente se vuelve cóncava a medida que se va acercando a ella.

Para generar diferentes gradientes se impusieron dos extracciones de calor, una de $12500 \text{ J/m}^2\text{s}$ y otra de $125000 \text{ J/m}^2\text{s}$. En la Fig. 3 se observa que la mayor extracción genera el mayor gradiente y presenta una interfase más plana en las cercanías de la partícula respecto a la obtenida con la menor extracción.

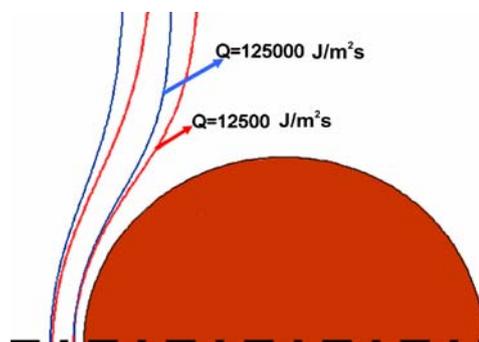


Figura 3. Forma de la interfase según diferentes velocidades de extracción de calor a 2 h diferentes.

De este resultado se puede observar que a mayor gradiente es mayor la estabilidad del sistema, y por lo tanto, se recupera más rápido de cualquier perturbación respecto al caso de gradientes menores. En este caso, el sistema es perturbado por la partícula cuya presencia tiene un menor efecto en la interfase a mayor gradiente. La forma de la interfase utilizada en el modelo de flujo de fluidos se calcula para el caso: $k_p/k_m=10$ y $q=12500 \text{ J/m}^2\text{s}$.

Modelo de flujo de fluidos

Se adoptó para la matriz las propiedades de un metal a la temperatura de fusión. En fase líquida la viscosidad es de $1,5 \cdot 10^{-3}$ Pa.s independiente de la temperatura. La fase sólida se simuló como un fluido de viscosidad (μ) igual a 10^6 veces la viscosidad de la fase líquida. Se adoptó para la partícula una densidad igual a 2700 kg/m^3 , igual a la matriz.

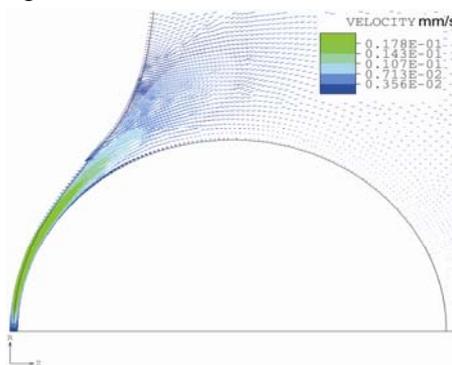


Figura 4. Flujo de fluidos alrededor de la partícula correspondiente a $V_{im}=3,3 \cdot 10^{-10} \text{ m/s}$, $R=5 \cdot 10^{-5} \text{ m}$ y $h=5 \cdot 10^{-6} \text{ m}$.

Un resultado típico de flujo de fluidos se muestra en la Fig. 4, donde se observa que el flujo alrededor de la partícula es continuo y laminar, las velocidades más altas se observan en la estrangulación entre partícula e

interfase. En ese canal el valor de Re es inferior a 1.10^{-6} en todos los casos simulados, por lo que asegura un flujo laminar en el modelo. El rango de velocidades impuesto varió entre 6.10^{-8} m/s y 8.10^{-4} m/s un valor de Fa fue calculado para cada velocidad y siete valores diferentes de h . Una malla fue confeccionada para cada h diferente. Graficando los valores de Fa en función de la velocidad de interfase, ver Fig. 5, se observa una tendencia lineal en un gráfico log-log, agrupados por el valor de h , representada por la línea oblicua de pendiente positiva.

Los resultados del modelo de flujo de fluidos muestran que cuando la interfase es cóncava, la fuerza de arrastre es mayor en al menos un orden de magnitud que el correspondiente a una interfase plana a un mismo h ⁽¹⁶⁾.

Modelo de fuerzas de repulsión

Los valores resultantes de integrar la fuerza de repulsión en las interfases cóncavas son independientes de la velocidad, por lo tanto, se representan por líneas horizontales en la Fig. 4.

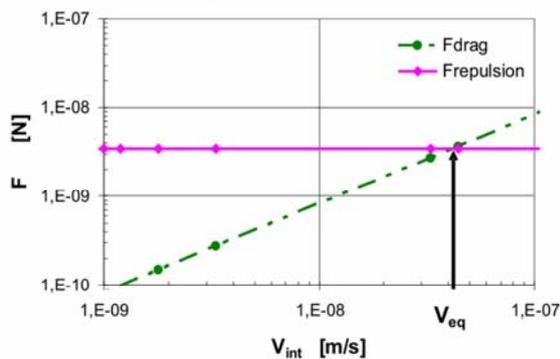


Figura 5. Gráficos de influencia de la velocidad de la interfase. Variación de Fa y Fr a velocidades entre 6.10^{-8} m/s y 8.10^{-4} m/s; $h=6.6.10^{-8}$ m

Las intersecciones entre las líneas de Fr y Fa para cada interfase en la Fig. 5, representan la velocidad de equilibrio del sistema en estado estacionario de repulsión. Los valores de h_{eq} y V_{eq} para interfases cóncavas y planas se grafican en la Fig. 6.

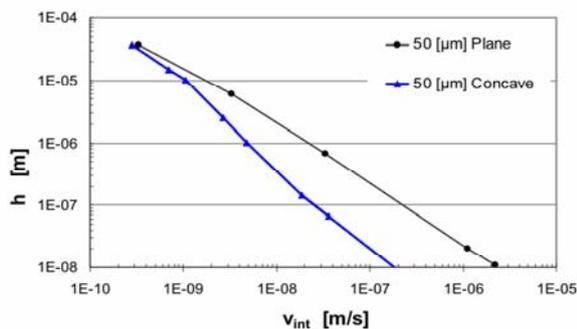


Figura 6. Gráficos de influencia de la velocidad de la interfase. Valores de h_{eq} para interfases cóncava y plana

Puede verse en la Fig. 6 que, cuando la velocidad aumenta, el h disminuye en ambos casos. Además, a

bajas velocidades, menores a 9.10^{-10} m/s, ambas interfases dan valores de h_{eq} similares y a velocidades mayores que $V_{eq}=1.10^{-9}$ m/s las separaciones de equilibrio para una interfase cóncava son menores que las obtenidas para interfases planas.

Ya que la velocidad crítica se puede obtener como la velocidad de equilibrio a $h=10^{-8}$ m ^(10,17,18), se desprende de la Fig. 6 que la velocidad crítica para una interfase cóncava es un orden de magnitud menor que para una interfase plana. Por lo tanto, a una misma velocidad la partícula se ubica más cerca de la interfase cuando ésta es cóncava. Estos resultados indican que puede esperarse mayor probabilidad de que ocurra el atrapado de la partícula en el sólido cuando la interfase es cóncava respecto a una interfase plana.

La curva que describe el modelo que relaciona h_{eq} y V_{eq} en interfase cóncava tiene un punto de inflexión en un gráfico log-log, en aproximadamente $V_{eq}=10^{-9}$ m/s, lo que establece una diferencia notable con respecto al modelo de interfase plana que tiene una variación casi lineal en el mismo gráfico.

IV. CONCLUSIONES

De acuerdo a los resultados de los modelos presentados en este trabajo las siguientes conclusiones pueden ser establecidas:

1. Las fuerzas de arrastre y las fuerzas de repulsión obtenidas con el modelo son significativamente mayores para la interfase cóncava respecto a una interfase plana.
2. La curva que describe el modelo que relaciona h_{eq} y V_{eq} en interfase cóncava tiene un punto de inflexión a aproximadamente $V_{eq}=10^{-9}$ m/s, lo que establece una diferencia notable con respecto al modelo de interfase plana el cual que presenta una tendencia casi lineal en un gráfico log-log.
3. La separación de equilibrio entre la partícula y la interfase en el estado de repulsión estacionario es un orden de magnitud menor para un interfase cóncava que para una interfase plana.
4. A velocidades de interfase menores a 1.10^{-9} m/s, la separación de equilibrio en una interfase cóncava es similar a la de la interfase plana.

V. AGRADECIMIENTOS

Los autores agradecen al CONICET por el soporte financiero.

IV. REFERENCIAS

1. Pikunov, M. V., 56-67, (Moscow: Metallurgizdat, 1957).
2. Uhlmann, D. R., Chalmers B. and Jackson K. A., J. Applied Physics 35, 2986-2993, (1964).
3. Bolling, G. F. and Cisse, J., J. Crystal Growth, 10, 56-66, (1971).
4. Chernov, A. A. and Temkin, D. E., 1976 Crystal Growth and Materials, 3-77, (North Holland, Amsterdam. Ed.

by E. Kaldis and H. J. Sheel, 1977).

5. Corte, A.E., *Journal of Geophysical Research*, Vol 67(3), 085-1090, (1962).
6. Kim, J. K. and Rohatgi, P. K., *Acta mater.* Vol. 46, No. 4, pp. 1115-1123, 1998
7. Catalina, A.V., Mukherjee, S., Stefanescu, D., *Metallurgical and Materials Transactions A*, 31., 2559-2568, (2000).
8. Hadji, L., *Mathematical and Computer Modelling*, 36, 147-156, (2002).
9. Garvin, J.W., Yang, Y., Udaykumar, H.S., *International Journal of Heat and Mass Transfer*, 50, 2969–2980, (2007).
10. Agaliotis, E., Rosenberger, M.R., Ares, A.E., Schvezov, C.E., *Journal of Crystal Growth*. Vol 310/7-9 pp 1366-1370, 2007.
11. Agaliotis, E., Rosenberger, M.R., Schvezov, C.E., Ares, A.E., in *Actas of the Sam/Conamet 2007*, San Nicolás, Buenos Aires, Argentina.
12. Rosenberger, M.R., Agaliotis, E.M., Schvezov, C.E., *Mecánica Computacional XXIV* 137-150, (2005).
13. Rosenberger, M.R., Agaliotis, E.M., Schvezov, C.E., *Anales AFA* 17 228-233, La Plata 2005, (2005).
14. Rosenberger, M.R., Agaliotis, E.M., Schvezov, C.E., “The Rohatgi Honorary Symposium on Solidification Processing of Metal Matrix Composites”, Nikhil Gupta; Warren Hunt. 2006 TMS Annual Meeting & Exhibition. San Antonio. TX. USA, 309-320, 2006.
15. Schvezov, C.E., “Dynamic Calculations for Particle Pushing” in *Solidification 1999*; Hofmeister, W. H., Rogers, J. R., Singh, N. B., Marsh, S. P. and Vorhes, P. W., Ed., TMS, 251-261, (USA 1999).
16. Rosenberger, M.R., Agaliotis, E.M., Schvezov, C.E., Ares, A.E., “Analysis of the interaction of particles with non-planar solidifying interface”, *Light Metals 2008 Volume 3: Cast Shop Technology* Edited by David DeYoung, 823-827, TMS 2008.
17. K.V. Sharp, R.J. Adrian, Transition from laminar to turbulent flow in liquid filled microtubes, *Exp. Fluids* 38 (1) (2005).
18. K. Travis, B. Tood, D. Evans, Departure from Navier–Stokes hydrodynamics in confined liquids, *Phys. Rev. E* 55, 4288, (1997).