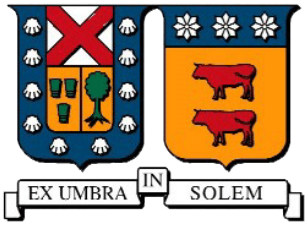
UNIVERSIDAD TÉCNICA FEDERICO SANTA MARÍA

DEPARTAMENTO DE INGENIERÍA DE MINAS, METALURGIA Y MATERIALES



UNIVERSIDAD TECNICA
FEDERICO SANTA MARIA

Desarrollo e implementación de modelo de predicción microestructural para simulación numérica del proceso WAAM.

Trabajo de memoria de titulación presentado en conformidad a los requisitos y reglamentos requeridos para obtener el título de Ingeniera Civil Metalúrgica

Profesor Guía: Dr. Martín Cisternas
Profesora Co-Guía: Dra. Karem Tello

Belén Johana Alvarado Sarabia

2026

CONSTANCIA DE VALIDACIÓN Y CONFIDENCIALIDAD DE MONOGRAFÍA A REPOSITORIO ACADÉMICO

1.- IDENTIFICACIÓN DEL TRABAJO ACADÉMICO

Tipo de monografía (marcar una opción): x Memoria o trabajo de título

Título del trabajo: "Desarrollo e implementación de modelo de predicción microestructural para simulación numérica del proceso WAAM"

Nombre del candidato(a): Belén Johana Alvarado Sarabia

Carrera / Grado: Ingeniera Civil Metalúrgica

Campus: Casa Central

Departamento: Departamento de Ingeniería de Minas, Metalurgia y Materiales.

2.- VALIDACIÓN DEL PROFESOR GUÍA/DIRECTOR DE TESIS

Yo, Martín Cisternas Fernández, en mi calidad de profesor(a) guía/director(a) del trabajo académico mencionado anteriormente **DEJO CONSTANCIA** que:

- He revisado esta versión del documento y corresponde a la versión final aprobada del trabajo.
- El trabajo cumple con los requisitos académicos y de formato establecidos por la institución.

3.- EVALUACIÓN DE CONFIDENCIALIDAD POR PROPIEDAD INDUSTRIAL (marcar una opción)

x El trabajo **NO contiene** información que amerite confidencialidad y puede ser publicado de inmediato en repositorio con acceso abierto.

4.- FIRMAS

Profesor(a) guía o director(a) de memoria o tesis:

Fecha: 19 de Octubre de 2026 **Firma:**



Estudiante o Candidato(a):

Fecha: 19 de Octubre de 2026 **Firma:**



Este formulario debe ser insertado como página 2 de la memoria o tesis, completado y firmado por estudiante y profesor(a) antes de la entrega en portal PRISMA de Biblioteca USM.

Para mi gatito Silvestre: tu compañía silenciosa, presente en cada paso, me enseñó que el amor no necesita palabras.

Con cariño.

RESUMEN

El proceso Wire Arc Additive Manufacturing (WAAM) es una alternativa de manufactura aditiva que utiliza un arco eléctrico igual al de soldadura para derretir el metal. Este procceso, permite la fabricación y reparación de componentes metálicos de gran tamaño, debido a su elevada tasa de deposición, mayor eficiencia en el uso de material y mayor flexibilidad en la fabricación de piezas complejas. Sin embargo, la calidad final de las piezas depende de los ciclos térmicos y de la evolución microestructural desarrollada durante la deposición. Esta evolución, cuenta con pocos estudios predictivos mediante simulación, lo que evidencia una brecha en la cantidad de simulaciones respecto de otros procesos.

Este trabajo tiene por objetivo ser un aporte en la modelación del proceso para predecir la formación de microestructura y la descripción de la cinética de solidificación. Para esto, se implementó en `OpenSolid` un modelo de deposición de materia y energía para representar el proceso WAAM. `OpenSolid` es un software desarrollado por el *Institut Jean Lamour* (UL-CNRS) dedicado a la simulación numérica de procesos industriales que involucra solidificación de aleaciones metálicas, tales como, colada de lingotes, colada continua de acero y colada semi-continua de aluminio, que permite la predicción microestructural del metal solidificado.

El modelo utilizado integró modelos de deposición de masa y energía puntual, balance de energía, nucleación de granos equiaxiales, conservación de masa, distribución de soluto y crecimiento de la envolvente dendrítica. El modelo se aplicó en un dominio computacional compuesto por un sustrato y un cordón rectangular equivalente de acero inoxidable ER308L, al cual se le generó un mallado que permitió resolver los modelos mediante el método de volúmenes finitos.

Se analizaron dos condiciones de aporte térmico con el propósito de determinar su influencia sobre la temperatura, la fracción sólida, la segregación de soluto, la velocidad y el radio de punta dendrítica, la extensión de la zona pastosa y la globularidad. Los resultados mostraron que un mayor aporte de calor produce temperaturas máximas más elevadas, menores velocidades de enfriamiento y una zona afectada térmicamente de mayor extensión. No obstante, las temperaturas máximas fueron considerablemente sobreestimadas debido a la concentración de energía generada por la fuente puntual empleada.

La evolución de la fracción sólida permitió distinguir una etapa inicial dominada por nucleación, seguida de un periodo de crecimiento acelerado de la envolvente y una etapa final controlada principalmente por el engrosamiento de la fracción sólida. Paralelamente, el rechazo de carbono hacia el líquido remanente aumentó su concentración y disminuyó la temperatura *líquidus* local, dificultando el avance de la solidificación.

En términos generales, el modelo reprodujo tendencias físicamente esperables y demostró la factibilidad de acoplar modelos térmicos y microestructurales en una plataforma de código abierto. Sin embargo, sus resultados deben interpretarse principalmente de manera cualitativa debido a las

simplificaciones asociadas a la fuente puntual, la ausencia de convección en el baño fundido y la falta de validación experimental.

ABSTRACT

The Wire Arc Additive Manufacturing (WAAM) process is an additive manufacturing alternative that uses an electric arc, similar to that employed in welding, to melt the metal. This process enables the manufacture and repair of large metallic components due to its high deposition rate, greater material efficiency, and increased flexibility in the fabrication of complex parts. However, the final quality of the manufactured components depends on the thermal cycles and the microstructural evolution developed during deposition. Predictive simulation studies addressing this evolution remain limited, revealing a gap in the number of numerical investigations compared with other manufacturing processes.

The objective of this work is to contribute to the modelling of the process by predicting microstructure formation and describing the solidification kinetics. For this purpose, a mass and energy deposition model was implemented in `OpenSolid` to represent the WAAM process. `OpenSolid` is a software developed by the *Institut Jean Lamour* (UL-CNRS) for the numerical simulation of industrial processes involving the solidification of metallic alloys, such as ingot casting, continuous steel casting, and semi-continuous aluminium casting, allowing the prediction of the microstructure of the solidified metal.

The model integrated pointwise mass and energy deposition models, an energy balance, equiaxed grain nucleation, mass conservation, solute redistribution, and dendritic envelope growth. The model was applied to a computational domain composed of a substrate and an equivalent rectangular ER308L stainless steel bead. A computational mesh was generated to solve the governing models using the finite volume method.

Two heat-input conditions were analysed in order to determine their influence on temperature, solid fraction, solute segregation, dendritic tip velocity and radius, mushy-zone extent, and globularity. The results showed that higher heat input leads to higher maximum temperatures, lower cooling rates, and a larger heat-affected zone. Nevertheless, the maximum temperatures were considerably overestimated due to the high energy concentration generated by the pointwise heat source employed.

The evolution of the solid fraction made it possible to distinguish an initial stage dominated by nucleation, followed by a period of accelerated dendritic-envelope growth and a final stage mainly controlled by the thickening of the solid fraction. At the same time, carbon rejection into the remaining liquid increased its concentration and decreased the local *liquidus* temperature, thereby hindering the progression of solidification.

Overall, the model reproduced physically expected trends and demonstrated the feasibility of

coupling thermal and microstructural models within an open-source platform. However, the results should be interpreted mainly in qualitative terms because of the simplifications associated with the pointwise heat source, the absence of convection in the molten pool, and the lack of experimental validation.

Índice general

1. Marco teórico **1**

1.1. Introducción 1

1.2. Wire Arc Additive Manufacturing (WAAM) 2

1.3. Variables del proceso 4

1.4. Modelos de Fuentes de calor 4

1.4.1. Solución de Rosenthal para una fuente movil 5

1.4.2. Fuente de calor de Goldak 6

1.5. Solidificación 8

1.5.1. Nucleación 9

1.5.2. Crecimiento 10

1.5.3. Modelos de distribución de soluto 11

Modelo de equilibrio 13

Modelo de Scheil 13

Modelo de Brody-Flemmings 14

Modelo trifásico de Volumen Promedio 15

1.5.4. Crecimiento: Cinética de solidificación y su efecto en la microestructura. . . . 17

Modelos macroscópicos 17

Modelo de velocidad de punta dendritica 18

1.6. Simulación de solidificación en WAAM 21

1.6.1. Escalas de simulación 21

1.6.2. Método de Volúmenes Finitos 21

1.7. OpenFOAM como plataforma de simulación 22

1.8. Trabajos Previos 23
1.9. Objetivos 26
1.9.1. Objetivo General: 26
1.9.2. Objetivos Específicos: 26

2. Metodología **27**
2.1. Definición de parámetros 27
2.2. Configuración geométrica y malla computacional 29
2.2.1. Generación de la geometría 29
2.2.2. Separación de las superficies del dominio 29
2.2.3. Generación de la malla 31
2.3. Modelo macroscópico 32
2.3.1. Modelo deposición de masa 32
2.3.2. Modelo de deposición de energía 34
2.3.3. Balances macroscópicos de predicción microestructural 35
2.3.4. Balance de masa de una fase k 36
2.3.5. Balance de soluto de las fases 36
2.3.6. Modelo de nucleación y conservación de núcleos 38
2.4. Descripción microscópica de crecimiento de granos 38
2.4.1. Modelo trifásico de distribución de soluto 38
2.4.2. Modelo de velocidad de punta dendrítica 40
2.4.3. Longitudes de difusión 41
2.5. Acoplamiento de Modelos y resolución de ecuaciones 42

3. Resultados y Discusión **45**
3.1. Efecto del aporte térmico sobre el comportamiento de la temperatura 45
3.1.1. Temperaturas máximas y velocidades de enfriamiento 45
3.1.2. Distribución espacial de la temperatura 46
3.2. Efecto del aporte térmico sobre las fases 48
3.2.1. Evolución temporal del sólido 48

3.2.2. Distribución espacial del soluto 49
3.3. Efecto del aporte térmico sobre la cinética dendrítica 51
3.3.1. Velocidad de punta dendrítica 51
3.3.2. Radio de punta dendrítica 53
3.3.3. Relación entre velocidad y radio de punta 53
3.4. Efecto del aporte térmico sobre la distribución espacial de la solidificación 55
3.4.1. Extensión de la Mushy Zone 55
3.4.2. Distribución del radio de punta y globularidad 56
3.5. Alcances y limitaciones del modelo 58

4. Conclusiones **60**

A. Nomenclatura **66**

B. Formulación de la malla **70**

B.1. Archivo `snappyHexMeshDict` 70

C. Cálculo de las longitudes de difusión **76**

Capítulo 1

Marco teórico

1.1. Introducción

En la actualidad, las técnicas convencionales de fabricación industrial han demostrado una baja eficiencia en el uso de recursos debido a la necesidad de procesos de mecanizado y al alto desperdicio de material asociado a la extracción de viruta, propia de los procesos de manufactura sustractiva. Para cuantificar este efecto, se utiliza la relación Buy-to-Fly (BTF), definida como el peso del material inicial requerido dividido por el peso de la pieza final. En la industria aeroespacial, el BTF puede ser de hasta 25:1. Es decir, para producir una pieza de 1 kg se requiere un bloque de material de 25 kg, lo cual implica un elevado desperdicio de aleaciones de gran valor, así como un alto consumo energético, lo que reduce la sustentabilidad del proceso [1].

En este contexto, las diferentes industrias manufactureras han optado por el desarrollo de procesos de manufactura aditiva, los cuales presentan una mayor eficiencia en el uso de material, debido a que permiten la fabricación de piezas con geometrías cercanas a la forma final. Como resultado, el uso del mecanizado se limita a las etapas de acabado, a diferencia de la manufactura sustractiva, donde se utiliza para fabricar la geometría completa. En consecuencia, este tipo de procesos presenta menos pérdida de material, lo que reduce la relación BTF hasta valores cercanos a 3:1-1.5:1 en el caso de la industria aeroespacial [1]. En el ámbito ambiental, la fabricación aditiva resulta ser beneficiosa para la reducción de la demanda energética y de las emisiones de dióxido de carbono [2]. Esta reducción de contaminantes permite disminuir el impacto ambiental asociado a los procesos de fabricación.

Los primeros antecedentes de fabricación aditiva mediante la superposición de capas se remontan a los trabajos desarrollados por Baker en 1920. Posterioremente, con el avance de las tecnologías de soldadura y la capacidad de diseñar figuras en CAD, este proceso demostró ser una alternativa sostenible, eficiente y con capacidad de crear piezas de geometrías complejas con optimización de costos y tiempos [3]. Sin embargo, para la inserción del proceso Wire Arc Additive Manufacturing (WAAM) en la industria existen diferentes desafíos actuales, como el control de porosidad, control

de microestructura, la velocidad de deposición, el baño de fusión y los ciclos térmicos para evitar defectos estructurales en la producción de las piezas y minimizar los desechos del proceso [4].

Para hacer frente a los desafíos mencionados, la evolución microestructural de la pieza y los ciclos térmicos de cada capa tienen un rol fundamental en la calidad y propiedades finales que obtenga la pieza. Sin embargo, debido a la modernidad de este proceso, aún existe una brecha de conocimiento relacionada a los parámetros recién mencionados que limitan la capacidad de predecir y controlar defectos como porosidades, rugosidad excesiva, zonas concentradoras de esfuerzos y microestructuras frágiles no deseadas.

Actualmente, la mayoría de los estudios realizados son a nivel experimental, lo cual no permite la optimización previa del proceso, ni la reducción de costos asociados a estas experimentaciones, provocando una brecha significativa en la cantidad de simulaciones predictivas que permitan mapeos de microestructuras y predicción de ciclos térmicos en piezas fabricadas por WAAM. Así, el presente trabajo tiene como finalidad contribuir en la predicción de microestructuras y de temperaturas que se producen a lo largo de un cordón de soldadura y su sustrato, implementando modelos de deposición de energía y materia para representar el modelo WAAM. Dichos modelos, serán luego útiles en la simulación de manufactura de componentes a través de WAAM, permitiendo la optimización del proceso: mejoras en la estrategia de trayectorias y parámetros de soldadura.

1.2. Wire Arc Additive Manufacturing (WAAM)

La manufactura aditiva por arco de alambre o *Wire Arc Additive Manufacturing* (WAAM) consiste en la utilización de un alambre metálico, el cual es fundido mediante un proceso de soldadura siendo depositado capa sobre capa, produciendo figuras geométricas complejas con menores costos de producción y en menores tiempos [5].

SW Williams [6] indica que la creación de un larguero de ala de 1,2Ti-6Al-4V mediante proceso WAAM, permitió un ahorro de material superior a 220kg respecto de las técnicas convencionales y presenta mejores propiedades de fatiga para el caso de esta aleación, sin embargo, presenta anisotropía en la resistencia mecánica y ductilidad a causa de la heterogeneidad de la microestructura .

El proceso WAAM se observa en la Figura 1.1. La figura muestra que el proceso cuenta con un sistema de alimentación de metal de aporte, el cual se funde mediante un arco eléctrico generado por una torcha de soldadura. Esta torcha se encuentra acoplada a un brazo robotico que controla su desplazamiento y velocidad [7].

El sistema se encuentra monitoreado por un sistema de control en el que se programan parámetros como la tasa de deposición del metal de aporte, velocidad de avance, corriente, trayectoria de avance y velocidad de alimentación del metal de aporte [7].

WAAM utiliza distintos procesos de soldadura para la aplicación de las capas, los cuales son selec-

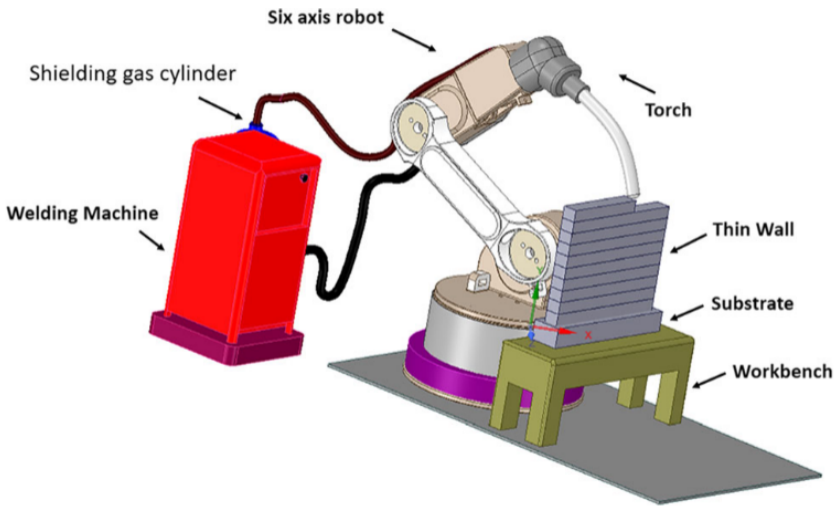


Figura 1.1: Esquema de trabajo proceso WAAM [7].

cionados dependiendo del material a trabajar. Entre los principales procesos de soldadura utilizados en WAAM se encuentran:

- Gas Metal Arc Welding
- Gas Tungsten Arc Welding
- Plasma Arc Welding

Gas Metal Arc Welding (GMAW) Consiste en un arco eléctrico donde la corriente fluye a través de un gas ionizado generado en la punta del electrodo consumible que se alimenta de manera continua, este factor genera la gran ventaja de obtener altas tasas de deposición logrando buena productividad [8]. Al ser un proceso de voltaje constante, la velocidad de alimentación del alambre influye en la cantidad de corriente aplicada a soldadura, pues, a mayor velocidad de alimentación el material debe aumentar el flujo de corriente para lograr fundir evitando que el arco eléctrico se acorte demasiado.

La dependencia entre la velocidad de alimentación y la cantidad de corriente afecta en el modo de transferencia pudiendo generar un arco inestable, con mal acabado superficial y salpicaduras, por lo que es importante trabajar con parámetros que permitan minimizar la distorsión [8].

Gas Tungsten Arc Welding (GTAW) corresponde a un electrodo de tungsteno no consumible para la generación del arco, administrando el metal de aporte de manera externa, un estudio realizado por Jaivindra Singh comparó este proceso con GMAW indicando que para cordones de acero inoxidable AISI 317 se obtuvieron paredes con una morfología más uniforme [8].

Plasma Arc Welding (PAW) utiliza un arco de plasma, el cual genera una columna de plasma de alta densidad térmica que le permite una buena estabilidad del arco permitiéndole una alta eficiencia y

produciendo soldadura de alta calidad y con poca distorsión para altas velocidades de avance de la torcha. Sin embargo, requiere una inversión mayor de capital [9].

1.3. Variables del proceso

Para lograr piezas finales de buena calidad, es necesario tener control sobre los parámetros operacionales de soldadura. Por lo tanto, una de las variables más importantes es el *calor aportado* (o *heat input*), HI, en $[J/mm]$ a la pieza, ya que esta determina la microestuctura de la zona fundida y de la zona afectada térmicamente (ZAT). Esta variable corresponde a la energía térmica que realmente ingresa al material durante el proceso WAAM por unidad de longitud y se encuentra relacionado con la corriente, I [A], voltaje, V [V], y velocidad de avance v_{avance} [m/s] según la Ecuación 1.1.

$$HI = \frac{\eta \cdot V \cdot I}{v_{avance}} \tag{1.1}$$

En este sentido la corriente y el voltaje aumentan la energía del arco y por lo tanto aumentarán el calor aportado al material, mientras que la velocidad de avance tiene una relación inversamente proporcional al calor aportado.

Además, los parámetros de operación influyen en la geometría del cordón despositado. Variaciones en la corriente, el voltaje o la velocidad de avance pueden modificar ancho, altura y penetración [10].

Esto demuestra que los parámetros de soldadura modifican el calor aportado y por lo tanto afectan la evolución de la solidificación, que se traduce en cambios dentro de la zona del metal fundido (FZ), la zona afectada térmicamente (ZAT) y la zona pastosa (Mushy Zone).

Otros parámetros importantes son la velocidad de alimentación del alambre, la cual controla la tasa de deposición, el tamaño del cordón y por lo tanto también tiene influencia en el balance térmico, ya que mientras más masa se deposita, más energía es utilizada en fundir esta masa [10].

La influencia de los parámetros mencionados puede estudiarse mediante simulación numérica. Esto representa una ventaja, ya que permite conocer variables difíciles de determinar mediante trabajos experimentales como campos de temperatura, fracciones de fase, velocidad de crecimiento,entre otras. Por esto, la simulación es una herramienta complementaria para la determinación de ventanas de trabajo.

1.4. Modelos de Fuentes de calor

Durante la solidificación de cada capa se debe cumplir un balance entre la energía aplicada y liberada al ambiente. El balance de energía para el proceso WAAM, está dado por la Ecuación 1.2.

$$\rho \frac{\partial h}{\partial t} = \nabla \cdot (k \nabla T) + S_h \tag{1.2}$$

Donde: ρ: Densidad del líquido [kg/m^3], C_p: Calor especifico [J/(kg $\cdot$ K)] ,Q: Fuente de Calor [W/m^3], T: Temperatura [K], k: Conductividad térmica $[W/m \cdot K]$ t : tiempo [s].

Finalmente, S_h corresponde al término fuente de calor volumétrica, es decir, a la energía térmica que aporta la antorcha al metal fundido, esta puede representarse de forma matemática como una fuente de calor puntual (ideal) o distribuida.

El modelo propuesto resuelve una ecuación de conservación de energía formulada en términos de la entalpía promedio, $h = g_l h_l + g_s h_s$, dónde g_l y g_s son las fracciones volumétricas de líquido y sólido respectivamente y $h_l = c_p T + L_f$ y $h_s = c_p T$ son las entalpías de la fase líquida y sólida, respectivamente, con c_p el calor especifico y T la temperatura. El modelo considera calor especifico constante.

1.4.1. Solución de Rosenthal para una fuente movil

Una fuente de calor puntual indica que todo el calor aportado se concentra en un solo punto del espacio. Un ejemplo es el modelo de Rosenthal, donde el sistema de coordenadas se mueve con la fuente de calor puntual móvil a una velocidad constante, permitiendo trabajar en un sistema estacionario, como se ve en la Figura 1.2:

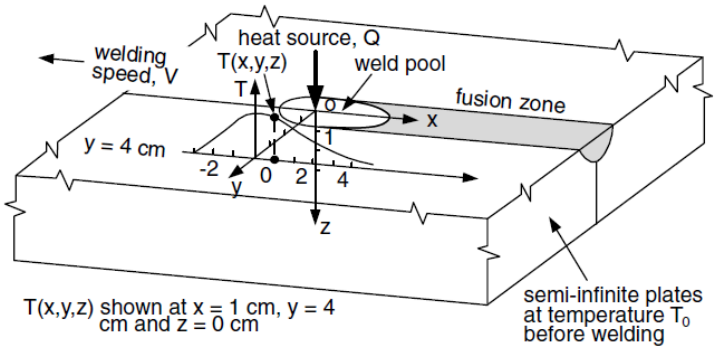


Figura 1.2: Flujo de calor tridimensional durante la soldadura de una pieza de trabajo semi infinita [11].

En este modelo, se utiliza un sistema de referencia que se desplaza junto con la fuente puntual a velocidad constante. De esta manera, las coordenadas espaciales se escriben en términos de la posición relativa de la fuente de calor en movimiento y el problema puede formularse bajo una condición cuasiestacionaria. Obteniendo un modelo mostrado en la ecuación 1.3

$$\frac{2\pi \left(T - T_0\right) kR}{Q} = \exp\left[-\frac{V(R-x)}{2\alpha}\right] \tag{1.3}$$

dónde R es la distancia radial entre el punto donde se evalúa la temperatura y la posición instantánea de la fuente de calor [m], T es la temperatura en cualquier punto del material [K], T_0 es la temperatura inicial (generalmente temperatura ambiente) [K], V corresponde a la velocidad de avance de la antorcha [m/s], α corresponde a la difusividad térmica del material [m^2/s], k corresponde a la conductividad térmica del material [$W/(m\,K)$], x corresponde a la coordenada en la dirección de la fuente de calor [m] y finalmente Q corresponde a la potencia de la fuente de calor [W] que se puede calcular según la Ecuación 1.4:

$$Q = \eta \cdot V \cdot I \tag{1.4}$$

dónde η corresponde a la eficiencia del proceso [$-$], V corresponde al voltaje [V] e I es la corriente [A].[11]

La solución de Rosenthal asume que los parámetros termofísicos del material son constantes y homogéneos en toda la pieza y no incorpora el calor latente asociado al cambio de fase. Además, al considerar estado estacionario la distribución de temperatura se mantiene constante respecto de la posición relativa de la fuente, asumiendo que no hay acumulación de calor. Finalmente, la solución presenta una singularidad en la posición de la fuente, donde la temperatura tiende a infinito en la misma posición de la fuente por singularidad. Por estas razones, la solución analítica de Rosenthal para la ecuación de conservación de energía formulada para el caso de una fuente móvil, presenta limitaciones en la precisión de resultados. En este sentido, Moda *et al.*[12] señalan que Rosenthal es decuada para fines educativos y exploratorios, donde la facilidad de uso se prioriza sobre la precisión.

1.4.2. Fuente de calor de Goldak

Otro tipo de fuente posible para modelar la fuente de calor que se observa en la Figura 1.3, corresponde a aquella con distribución gaussiana del tipo doble elipsoide o del modelo de Goldak, el cual resulta más conveniente y preciso para simular soldaduras reales [13].

El modelo de Goldak plantea que la energía está distribuida dentro de un volumen finito, diferenciando el modelo en la parte trasera de la fuente y la parte frontal de esta eliminando singularidades. En la región trasera de la fuente ($x < 0$ en la Figura 1.3) la distribución volumétrica de energía está definida por la Ecuación 1.6, mientras que en la parte frontal ($x > 0$ en la Figura 1.3) la energía se define con la Ecuación 1.5.

$$q_f(x,y,z,t) = \frac{6\sqrt{3} f_f Q_{arc}}{a_f bc\sqrt{\pi^3}} \exp\left(-3\left(\frac{x^2}{a_f^2} + \frac{y^2}{b^2} + \frac{z^2}{c^2}\right)\right) \tag{1.5}$$

$$q_r(x,y,z,t) = \frac{6\sqrt{3} f_r Q_{arc}}{a_r bc\sqrt{\pi^3}} \exp\left(-3\left(\frac{x^2}{a_r^2} + \frac{y^2}{b^2} + \frac{z^2}{c^2}\right)\right) \tag{1.6}$$

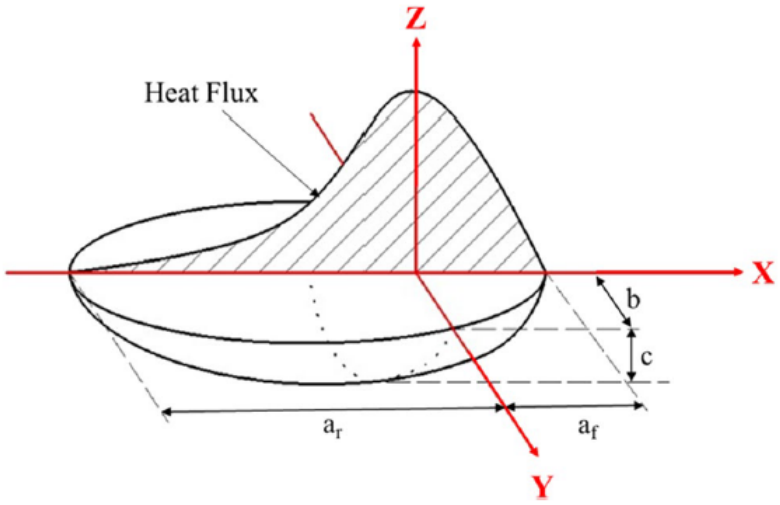


Figura 1.3: Modelo de fuente de calor de doble elipsoide de Goldak [13].

dónde f_f y f_r son las fracciones de distribución de calor en la parte frontal y trasera de la fuente de calor [−], a_f y a_r corresponden a las longitudes del baño de soldadura en la zona frontal y trasera de la fuente de calor a lo largo de la dirección z [m], b es el ancho del cordón [m], c es la profundidad de este [m] y finalmente Q es la potencia de la fuente [W] descrita por la ecuación 1.4[13].

El modelo de Goldak (GHS) fue trabajado y modificado por Yazdi *et al.* [14] , quien introdujo a la ecuación un offset respecto del origen del arco (Z_0), para mejorar la precisión del modelo obteniendo los resultados observados en el gráfico de la Figura 1.4 , donde se comparan con resultados obtenidos por Chergui *et al.* [15]. Además, se validan los resultados de simulación con resultados experimentales demostrando que el modelo modificado (MGHS) mostró un error de un 2,75 % en comparación al 10 % de error obtenido por el modelo estándar [14].

Yazdi *et al.* [14] estimaron valores de Z_0 para aceros dúplex estudiados y distintas aleaciones de aluminio, observando diferencias entre materiales, estos resultados confirman que el offset añadido depende de las propiedades del material. Además, se demostró que el parámetro varía dependiendo del número de capa que se esté construyendo, lo que demuestra la dependencia de las condiciones operacionales del proceso.

En resumen, la fuente puntual representa una aproximación simplificada e ideal donde la energía se concentra en una zona reducida, lo que puede generar máximos térmicos elevados y gradientes abruptos. En cambio, el modelo de Goldak distribuye la energía en un volumen finito, representando de forma más realista la geometría del baño fundido. Por esta razón, la comparación entre ambos modelos permite evaluar cómo la representación de la fuente de calor afecta los ciclos térmicos, la tasa de enfriamiento y los parámetros de solidificación utilizados para predecir microestructura.

Un mejor modelo de deposición de energía permite describir con mayor precisión los gradientes térmicos y el enfriamiento en la piscina líquida, y en consecuencia permite obtener una mejor

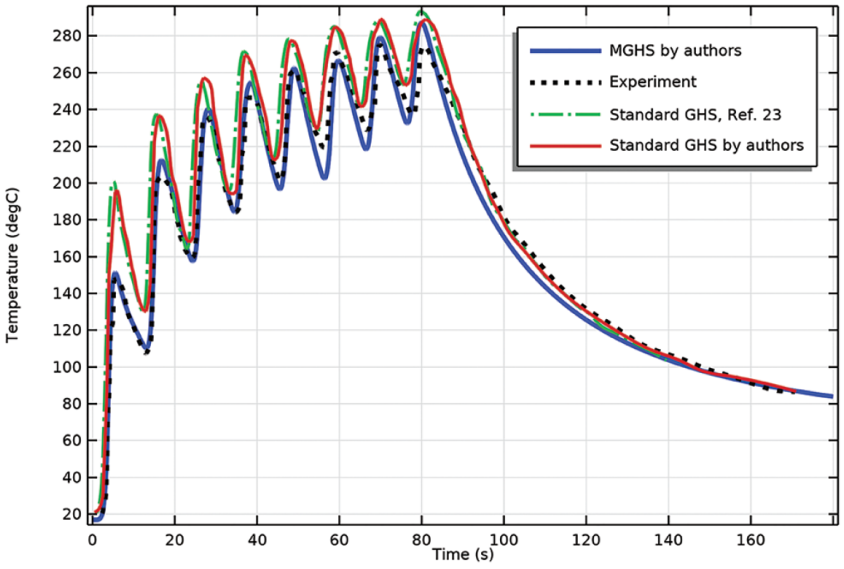


Figura 1.4: Perfiles de temperatura experimentales y simulados para WAAM en aluminio AA5356 por Chergui *et al.* [15], comparados con el modelo MGHS propuesto y el modelo GHS estándar por los autores Yazdi *et al.*[14].

representación de la solidificación.

Además, los modelos térmicos permiten representar en una escala macroscópica la transferencia de calor, obteniendo así, valores para los gradientes térmicos y razón de enfriamiento del componente manufacturado. Sin embargo, un modelo macroscópico por sí solo no entrega una descripción del crecimiento microestructural, por lo que, si se quiere predecir microestructura, estos modelos macroscópicos deben ser acoplados a modelos de solidificación que expliquen la distribución del soluto durante este cambio de fases.

1.5. Solidificación

La solidificación corresponde a la transformación de un material desde el estado líquido al estado sólido durante el enfriamiento. Comprender este fenómeno es importante para el estudio de la microestructura, ya que de esta dependen en las propiedades mecánicas del material. En consecuencia, dado que la microestructura desarrollada durante la solidificación depende de parámetros como la velocidad de crecimiento, el gradiente térmico, el subenfriamiento y la composición de la aleación, variaciones en estas condiciones pueden significar cambios en las propiedades mecánicas del material.

1.5.1. Nucleación

A nivel termodinámico, a temperaturas sobre la temperatura de fusión, la fase líquida corresponde al estado estable del sistema, debido a que presenta una menor energía libre de Gibbs que el estado sólido. En cambio, una vez que la temperatura disminuye por debajo de la temperatura de fusión, el estado de menor energía libre es el estado sólido, por lo que este se vuelve termodinámicamente estable como se observa en la Figura 1.5.

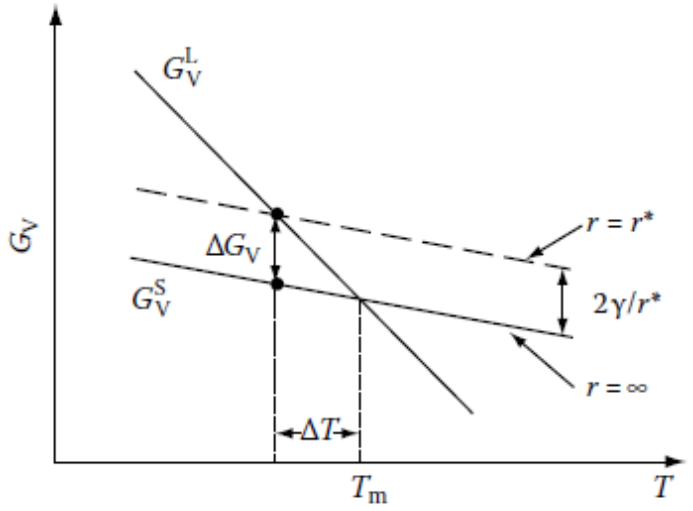


Figura 1.5: Energía libre volumétrica en función de la temperatura para las fases sólida y líquida, mostrando el origen de G_V y r^* [16].

En la Figura 1.5 G_V^L y G_V^S representan las energías libres de Gibbs por unidad de volumen de las fases líquida y sólida. ΔG_v corresponde a la diferencia de energía libre volumétrica que actúa como fuerza impulsora para la transformación, T_m corresponde a la temperatura de fusión, r corresponde al radio del nucleo y r^* corresponde al radio crítico. El termino $2\gamma/r^*$ corresponde al efecto de la curvatura de la interfase sólido-líquido, donde γ corresponde a la energía de la interfase.

A partir de lo anterior,la formación de un núcleo de sólido dentro del líquido, implica la formación de una nueva interfase sólido-líquido que contiene cierta energía interfacial que aumenta la energía total del sistema. Por lo tanto, la variación total de energía libre corresponde a un balance entre la energía que disminuye por la transformación líquido a sólido y la energía aumentada por la formación de la interfase.

De esta forma, para que se forme el núcleo y pueda crecer, la cantidad de energía que disminuye por la transformación líquido sólido debe superar a la cantidad de energía asociada a la formación de la interfase. Es por esto, que la solidificación, no ocurre a la temperatura exacta de la temperatura de fusión, sino que a cierto sobreenfriamiento que genere la fuerza impulsora necesaria con un delta de energía libre entre el sólido y el líquido ΔG suficiente para permitir la creación de la interfase

sólido líquido.

De este modo, el sobreenfriamiento debe producir un ΔG_v mayor a la energía crítica y los núcleos deben alcanzar un radio superior al radio crítico para poder crecer. La barrera de energía crítica, depende del tipo de nucleación que ocurra.

El fenómeno de nucleación heterogénea ocurre cuando el núcleo se forma a partir de un sólido preexistente y es la causa principal de nucleación en los procesos reales de solidificación, ya que tiene una menor barrera energética, pues, como se ve en la Figura 1.6, ahora el balance ocurre entre las distintas energías superficiales asociadas a los 3 tipos de superficie y que dependen del ángulo de mojado θ.

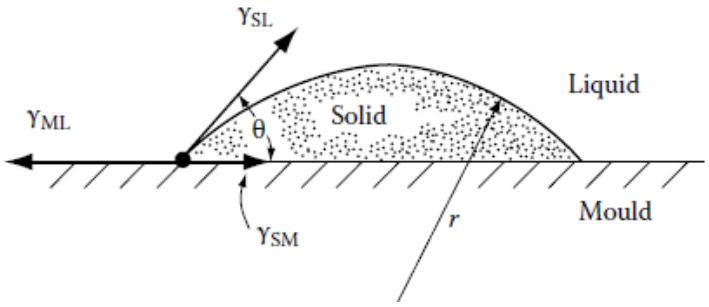


Figura 1.6: Nucleación heterogénea de un casquete de esfera sobre una pared plana de un molde [16].

A un menor ángulo de mojado, se tiene una menor barrera energética, por lo que se necesita un menor sobreenfriamiento, permitiendo que la nucleación ocurra a unos sobreenfriamientos de pocos grados Celsius. Este sólido puede ser el sustrato o inoculantes aplicados en el proceso.

1.5.2. Crecimiento

Una vez el sólido nuclea, *i.e.* un grano aparece a partir de un núcleo, este puede tener distintos modos de crecimiento. En este sentido, como el núcleo se formó mediante nucleación heterogénea, este va a tender a crecer con la orientación cristalográfica del sustrato desde el cual nuclea, lo cual se conoce como crecimiento epitaxial. Sin embargo, si los materiales son de distinta estructura cristalina, no tendrán los mismos planos preferentes y deben nuclear nuevos granos en el límite de fusión que sería crecimiento no epitaxial.

Luego, el modo de crecimiento, depende de las condiciones termodinámicas locales como: gradientes de temperatura, tasa de enfriamiento, concentración de soluto en las fases, etc. En este sentido Sindo Kou [11] , propone que el modo de solidificación varía a través de la zona de fusión según la Figura 1.7.

Teniendo justo en la línea de fusión una pequeña zona de crecimiento planar y a medida que se

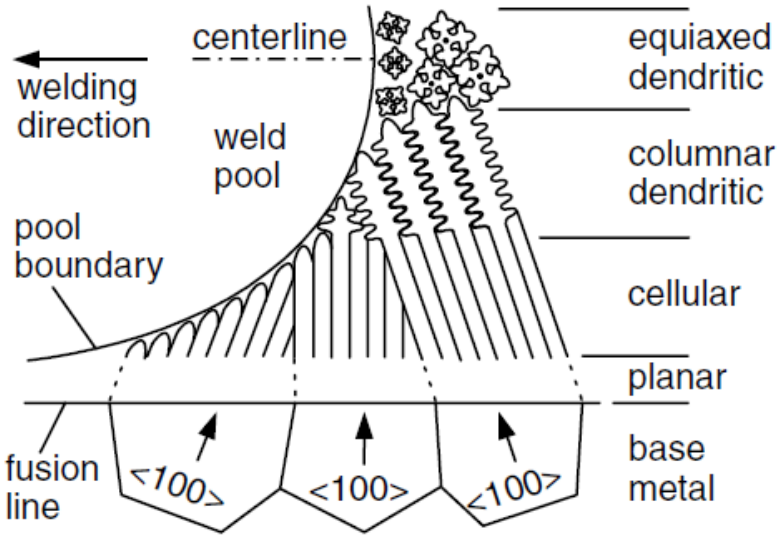


Figura 1.7: Evolución de los modos de crecimiento a través de la zona de fusión

avanza hasta la línea central del cordón se van favoreciendo microestructuras celulares, dendríticas columnares y finalmente equiaxiales dendríticas.

Además, durante la solidificación el líquido presenta un movimiento convectivo originado por distintas fuerzas impulsoras. Entre estas fuerzas se encuentra las fuerzas de Marangoni, originadas por los gradientes de tensión superficial asociados a las variaciones de temperatura y composición. Otras fuerzas que impulsan el movimiento convectivo, son las fuerzas electromagnéticas o de Lorentz, producidas por la interacción entre la corriente eléctrica y el campo magnético. Finalmente otras fuerzas corresponden a las fuerzas de flotación, producidas por la diferencia de densidad dentro del líquido.

El movimiento convectivo del líquido genera el movimiento de los granos equiaxiales, pudiendo modificar la distribución espacial de los granos dentro de la piscina líquida y por lo tanto puede influir en la evolución de la microestructura.

1.5.3. Modelos de distribución de soluto

Durante la solidificación de una aleación, la redistribución de soluto entre las fases sólida y líquida depende del coeficiente de partición k_p Para $k_p < 1$, el soluto presenta una menor solubilidad en la fase sólida respecto de la fase líquida y, en consecuencia, al ocurrir la transformación el sólido rechaza soluto hacia la fase líquida. Para $k_p > 1$, ocurre el comportamiento contrario. En el caso del carbono en las aleaciones de hierro consideradas en este trabajo,$k_p < 1$, por lo que el avance de la interfase sólido-líquido produce un enriquecimiento de carbono en el líquido remanente. Este fenómeno es clave para el subenfriamiento constitucional, producido por la segregación de soluto

que tiene como consecuencia la variación de temperatura *líquidus* a lo largo del líquido como se muestra en la Figura 1.8. Donde en a) se observa el diagrama de fases binario, con las curvas *líquidus* y *solidus* aproximadas a rectas con temperatura *líquidus* (T_l) y temperatura *solidus* (T_s) representando una aleación de composición C_0 inicial y en donde b) se observa el subenfriamiento constitucional.

La recta roja representa la temperatura real comparada con el perfil de temperatura de *líquidus* local. Cuando el sólido expulsa soluto, la concentración del líquido cercano a la interfase aumenta y por lo tanto la línea *líquidus* a esa concentración más alta es menor. Esto se ejemplifica en la Figura 1.8.

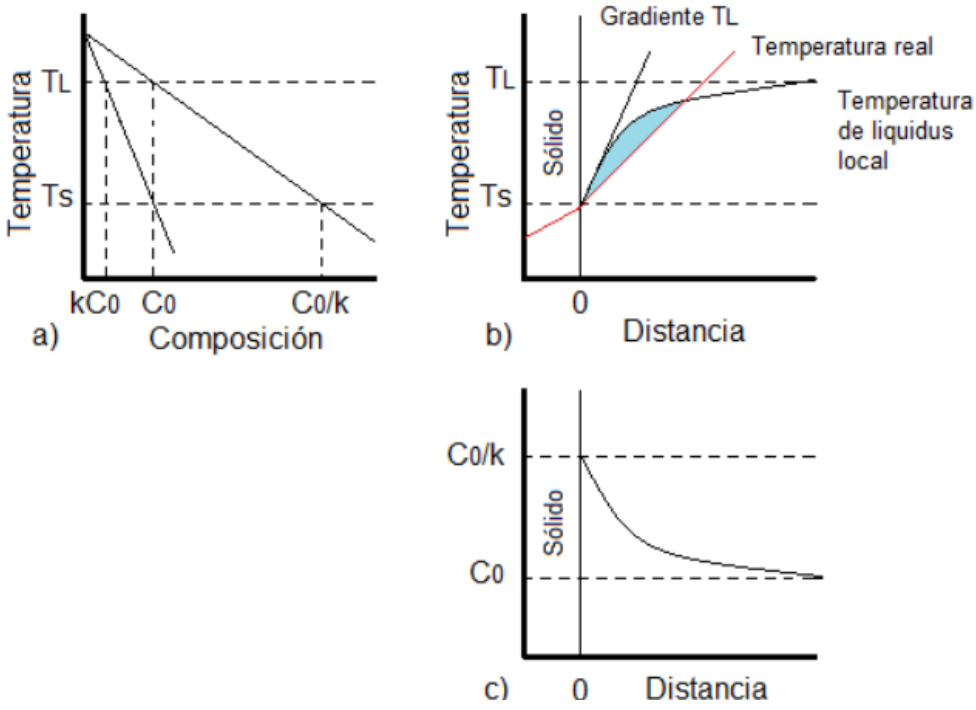


Figura 1.8: a) Fracción de un diagrama de fase binario, b) Perfil de temperatura *Líquidus*, c) Perfil de concentraciones en el líquido. En b) y c), se muestra cómo el aumento de concentración justo después de la interfase hace que la temperatura local del *líquidus* disminuya a esa misma cercanía de la interfase

Esta variación de temperatura *líquidus* se puede aproximar como una línea (en el caso de aleación binaria) tal y como lo presenta la Ecuación 1.7:

$$T_L = T_f + m_L \cdot C_l \tag{1.7}$$

Dónde T_L es la temperatura *líquidus* [K], T_f la temperatura de fusión de la sustancia pura [K], m_L la pendiente pendiente de la recta que representa *líquidus* [K/wt. %] y $C_L[wt.\%]$ la concentración de soluto en el líquido $[wt.\%]$.

El subenfriamiento constitucional, junto con las condiciones termodinámicas locales (tasa de enfriamiento y concentración de elementos aleantes, conducen a diferentes tipos microestructuras posibles y, por lo tanto, a diversas propiedades mecánicas del material [18].

La formación de un núcleo sólido conlleva la expulsión de soluto al líquido inmediatamente continuo a este, generando gradientes de concentración de soluto en la escala de un grano, que han sido caso de estudio a lo largo de la historia, mediante distintos modelos de distribución, de los cuales se presentan algunos a continuación.

Modelo de equilibrio

En un comienzo, se plantea el modelo de solidificación en el equilibrio o regla de la palanca, en el cual el sólido formado tiene difusión completa dentro de este y el líquido se encuentra completamente mezclado de manera que ambas fases en todo momento de la solidificación son homogéneas y mantienen las concentraciones del equilibrio según la ecuación 1.8.

$$C_s = k_p C_l \tag{1.8}$$

Donde k_p corresponde al coeficiente de partición y C_s a la concentración de soluto en el sólido. Así, la Figura 1.9 representa el avance de la interfase sólido-líquido y el perfil de concentraciones para una temperatura T en el intervalo entre las temperatura *líquidus* y *solidus*. Además, durante la solidificación dendrítica, la distribución de soluto se produce a escalas espaciales del espaciamiento secundario entre brazos dendriticos o *Secondary Dendrite Arm Spacing* (SDAS) y es a esta escala que se encuentra la interfaz sólido líquido mostrada [16]. En un modelo de microsegregación de *regla de la palanca* el soluto difunde infinitamente rápido en ambas fases.

.

Modelo de Scheil

Para acercarse a la fenomenología real, se considera en un comienzo el modelo de no difusión en el sólido y líquido perfectamente mezclado, como es el caso del modelo de Scheil en el cual se plantea por primera el término de subenfriamiento.

En aleaciones, la estabilidad de la interfase se ve afectada por el gradiente de temperatura dentro del líquido, el gradiente de concentración en el líquido subenfriado y la velocidad de avance. El modelo de Scheil describe como es la distribución de soluto durante el proceso de solidificación de manera simplificada con los supuestos de no difusión en el sólido y líquido homogéneo en todo según la ecuación 1.9.

$$C_s = k\, C_0\, (1 - f_s)^{k-1} \tag{1.9}$$

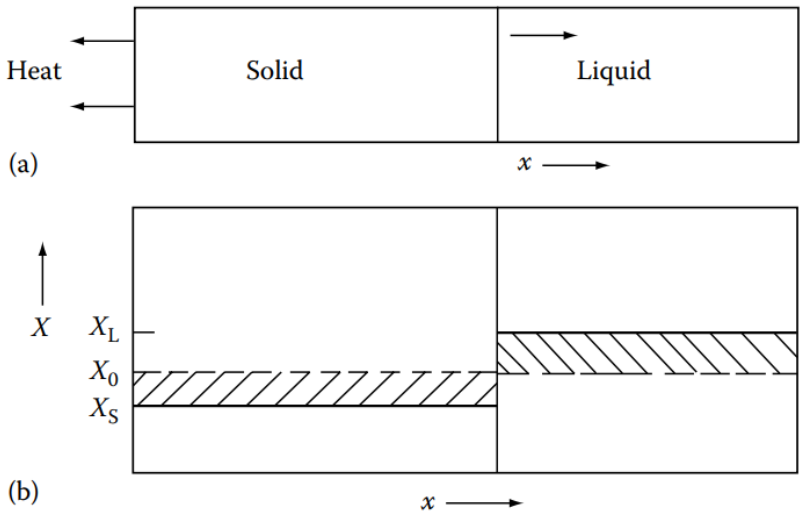


Figura 1.9: a) Interfaz planar S/L y flujo de calor axial, b) Perfil de composición correspondiente en T asumiendo equilibrio completo [16].

Donde k_p Corresponde al coeficiente de distribución o partición [−], C_s a la concentración de soluto en el sólido [−], C_0 a la concentración inicial de soluto en la aleación [−] y f_s corresponde a la fracción másica de sólido formado [−].

Ferreira A *et al.*[19] comparó resultados experimentales con simulaciones del modelo de Scheil, comprobando que este modelo logra una aproximación aceptable al perfil de concentración durante la solidificación sobre todo cuando no hay retro difusión y la aleación es binaria. La mayor limitación del modelo es que, al no considerar difusión en estado sólido, los resultados se desvían en mayor medida para aquellas zonas en las que hay mayor cantidad de brazos dendríticos secundarios, por lo que este modelo requiere ser complementado para aplicaciones industriales .

Además de los modelos de regla de la palanca y de Gulliver-Scheil, existen modelos que sí consideran la difusión en estado sólido (retro-difusión), como es el caso del modelo Brody-Flemmings.

Modelo de Brody-Flemmings

El modelo de Brody-Flemmings permite cierta difusión en el sólido, ajustando la difusión a la primera Ley de Fick, en la cual el flujo de soluto en el sólido depende del gradiente de concentración dentro de este y del coeficiente de difusión del soluto. Además, este modelo añade una relación de crecimiento obteniéndose el modelo de la Ecuación 1.10.

$$C_s = kC_0\left(1+(\alpha k-1)f_s\right)^{\frac{1-k}{\alpha k-1}} \quad ; \quad \alpha = 2\left(\frac{D_s t_o}{y_0^2}\right) \tag{1.10}$$

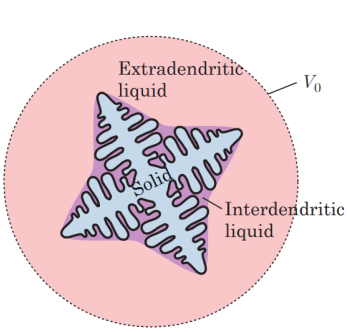
donde D_s corresponde al coeficiente de difusión del soluto en la fase sólida [m^2/s], t_0 al tiempo carac-

terístico de solidificación [s] y y_0 a una longitud característica asociada al espaciamiento dendrítico [m]. Por lo tanto, y_0^2 corresponde al cuadrado de esta longitud característica [m^2] [20].

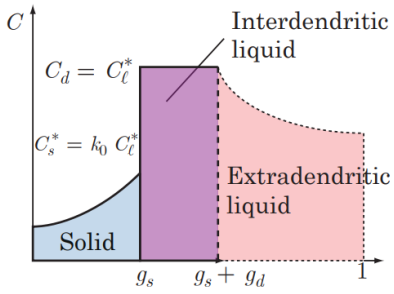
Steiner *et al.*[20] demuestran que, si bien este modelo permite replicar perfiles experimentales que no se pueden lograr por el modelo de enfriamiento de Scheil, el modelo posee resultados que se alejan del comportamiento real para valores de α mayores que 1. En general, la difusión de soluto en la fase sólida es órdenes de magnitud menor que en la fase líquida. Esta diferencia justifica que aproximaciones como Gulliver-Scheil, que desprecia la difusión en el sólido, continúen siendo utilizadas para describir la microsegregación. Sin embargo, para representar de manera más detallada la distribución espacial del soluto es necesario considerar las distintas regiones líquidas y sólidas presentes dentro de un volumen representativo, como es el caso del modelo trifásico de volumen promedio utilizado en el presente trabajo.

Modelo trifásico de Volumen Promedio

Otra deficiencia de los modelos mencionados hasta ahora es que todos son soluciones propuestas en planos unidimensionales, no considerando lo que ocurre a nivel volumétrico, en este sentido se plantea el modelo físico de volúmenes promedios que considera difusión limitada para las 3 fases asociadas, como se observa en la Figura 1.10a.



(a) Representación física del modelo trifásico.



(b) Distribución de la concentración de soluto en las distintas regiones.

Figura 1.10: Representación del modelo trifásico de volumen promedio [21].

La Figura 1.10b representa la distribución de la concentración de soluto en las distintas regiones consideradas por el modelo. La región comprendida entre 0 y g_s corresponde a la fase sólida, cuya concentración de soluto varía espacialmente y aumenta al aproximarse a la interfase sólido-líquido. Entre g_s y $g_s + g_d$ se encuentra el líquido intradendrítico contenido dentro de la envolvente, en el cual, para este trabajo se considera una concentración homogénea al igual que Dantzig *et al.*[21]. Finalmente, la región ubicada fuera de la envolvente corresponde al líquido extradendrítico, donde la concentración de soluto disminuye a medida que aumenta la distancia respecto de la interfase.

El modelo plantea un modelo 3D en el cual se tiene una fracción de volumen sólido, una fracción de

líquido intra dendrítico envolvente, el cual se representa por un octaedro de 6 puntas y finalmente una fracción de volumen de líquido extra dendrítico representado por una esfera que rodea las 2 fracciones anteriores [22].

El modelo consiste en 4 ecuaciones diferenciales, de las cuales, 3 representan el balance de soluto para cada fase, para el sólido se tiene la Ecuación 1.11, para el líquido intra dendrítico por la Ecuación 1.12 y finalmente, el líquido extra dendrítico según la Ecuación 1.13:

$$\frac{d\left(g_s\langle C\rangle_s\right)}{dt} = k_0 C_l^* \frac{dg_s}{dt} + S_v^{sd} D_s \frac{\partial C_s}{\partial n} \tag{1.11}$$

Donde g_s corresponde a la fracción volumétrica de sólido [−], $\langle C\rangle_s$ corresponde a la concentración promedio de soluto en la fase sólido [−], k_0 corresponde al coeficiente de partición del soluto [−], C_l^* indica la fracción másica de soluto en el líquido [−], S_v^{sd} representa el área superficial entre la fracción sólida y el líquido intra dendrítico [1/m] y n representa el vector normal a la superficie [−].

En la Ecuación 1.11, el término de la izquierda es el cambio temporal de soluto en la fase sólida, mientras que el primer término de la derecha de la ecuación representa la cantidad de soluto que se incorpora al sólido cuando el frente de solidificación avanza. El último término corresponde a la difusión de soluto a través de la de la interfaz del sólido y el líquido intra-dendrítico, es decir, considera difusión de soluto en el sólido.

El balance del líquido intra-dendrítico viene planteado por:

$$\frac{d\left(g_d C_l^*\right)}{dt} = C_l^* \frac{dg_d}{dt} + \left(1 - k_0 C_l^*\right) \frac{dg_s}{dt} + S_v^{de} D_l \frac{\partial C_e}{\partial n} - S_v^{sd} D_s \frac{\partial C_s}{\partial n} \tag{1.12}$$

Donde $\langle C\rangle_s$ corresponde a la concentración promedio de soluto en la fracción de sólido [−], $\langle C\rangle_e$ representa la concentración promedio de soluto en el líquido extra dendrítico. k_0 corresponde al coeficiente de partición del soluto [−], C_l^* indica la fracción másica de soluto en el líquido [−], S_v^{de} representa el área superficial entre el líquido intra dendrítico y líquido extra dendrítico [1/m]

El balance de soluto en el líquido extra-dendrítico se puede escribir como:

$$\frac{d\left(g_e\langle C\rangle_e\right)}{dt} = -C_l^* \frac{d\left(g_s + g_d\right)}{dt} - S_v^{de} D_l \frac{\partial C_e}{\partial n} \tag{1.13}$$

Este último balance indica que el cambio temporal del contenido de soluto en el líquido extra-dendrítico es igual que la suma del soluto extraído de g_e y que pasa a las regiones sólidas e inter-dendríticas, por el avance de la solidificación, el segundo término representa el flujo de soluto a través de la interfase de líquidos.

Si bien estos modelos entregan información respecto de la distribución de soluto, no entregan información de la cinética de crecimiento de las dendritas, por lo tanto, es necesario acoplar al modelo de volumen promedio un modelo que indique de qué forma crecen estas dendritas y la velocidad a

la que lo hacen.

1.5.4. Crecimiento: Cinética de solidificación y su efecto en la microestructura.

Modelos macroscópicos

A nivel macroscópico, el gradiente de temperatura (G) y la velocidad de avance de la interfaz sólido-liquido (R) representan la cinética de solidificación. En este sentido,a mayores gradientes térmicos y bajas velocidades de crecimiento se tiene que el frente es más estable, debido a que la baja velocidad de avance favorece la difusión de soluto hacia el líquido evitando la acumulación de este en la interfase y el alto gradiente térmico indica que la temperatura varía con una pendiente más pronunciada a lo largo del líquido. Estas dos condiciones generan un nulo subenfriamiento constitucional, promoviendo la estabilidad del frente.

Por el contrario, si la velocidad de crecimiento es más rápida, hay menor difusión de soluto, por lo que el soluto rechazado se acumula en el líquido adyacente al frente, provocando una disminución de la temperatura *líquidus* en esta zona. Si además el gradiente térmico es bajo, la temperatura del líquido no alcanza a disminuir a la misma velocidad que la temperatura *líquidus* produciendo subenfriamiento constitucional lo que desestabiliza el frente de solidificación y favorece la solidificación dendrítica.

Así, Sindo Kou [11], demuestra que a altas razones G/R el metal solidifica con frente planar y a medida que se disminuye esta razón se favorecen solidificaciones del tipo celular o dendrítica, como se observa en la Figura 1.11.

Por esto, la relación G/R es una aproximación válida al tipo de crecimiento, pero no logra ser predictiva por sí sola, porque requiere de datos experimentales para describir la estabilidad del frente y varía dependiendo del proceso y la aleación. Además, Hozoorbakhsh *et al.* [23] demostró que esta relación varía dentro de los cordones de soldadura, debido a las diferencias de R que existen dentro del cordón,debido a que R corresponde a una velocidad local del frente de solidificación definido por la ecuación 1.14, donde θ corresponde al angulo entre la dirección de avance y la normal local a la interfase.

$$R = v_{avance} \cos(\theta) \tag{1.14}$$

Por lo anterior, diferentes regiones del cordón presentan distintas velocidades locales de solidificación, aun cuando la velocidad de avance de la antorcha permanezca constante. Esto hace necesario complementar esta relación con modelos de crecimiento dendrítico que consideren la velocidad de la punta dendrítica, caracterizando la cinética a un nivel microscópico, con mayor precisión.

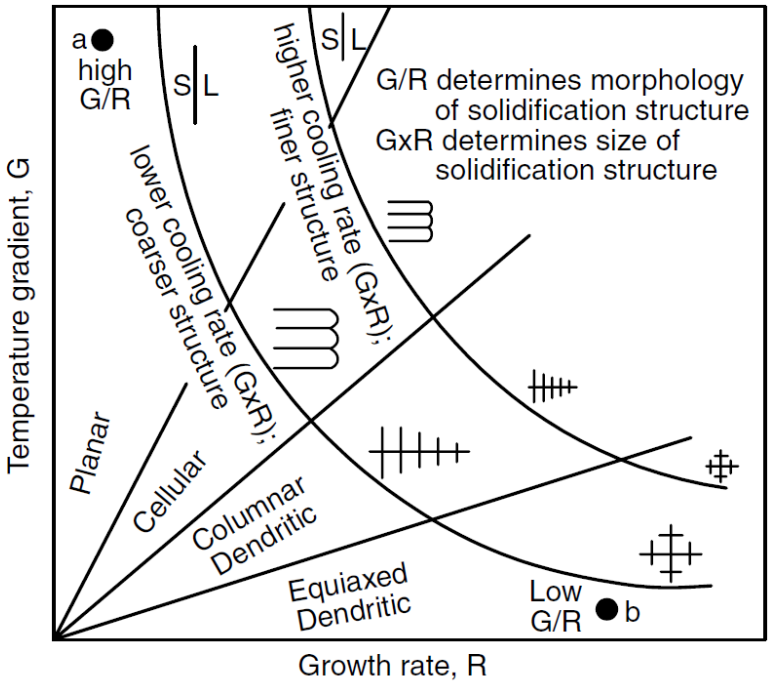


Figura 1.11: Efecto del gradiente de temperatura (G) y la velocidad de crecimiento (R) sobre la morfología y el tamaño de la microestructura de solidificación [10].

Modelo de velocidad de punta dendritica

A nivel microscópico, las puntas de las dendritas avanzan con una velocidad que depende del subenfriamiento en la punta, es decir, en este casola cinética se encuentra gobernada por el gradiente solutal entre la punta y el campo lejano (*far-field*). Así, la cinética de crecimiento dendrítico puede describirse mediante el modelo de Lipton-Glicksman-Kurz (LGK), el cual relaciona la velocidad y el radio de la punta dendrítica con los campos térmico y solutal existentes alrededor de ella.

El modelo de velocidad de punta se utiliza para simular y predecir como se genera la microestructura de solidificación, en particular el modelo de crecimiento de punta dendrítica paraboloide se encuentra descrito en la Ecuación 1.15 [24]:

$$R_{tip}^2 V_{tip} = \frac{\Gamma_{GT}}{\sigma^*} \left[\frac{m_l(1-k)C_0}{D_l\left(1-(1-k)\Omega_C\right)} + \frac{L_f}{2\alpha c_p} \right]^{-1} \tag{1.15}$$

Donde, R_{tip} corresponde al radio de la punta dendrítica [m] y V_{tip} denota la velocidad de punta [m/s], luego en el lado derecho del balance se tiene que Γ_{GT} es el coeficiente de Gibbs-Thomson [K m] que explica la relación entre la curvatura de la interfase sólido líquido y la temperatura de fusión local, mientras que σ^* corresponde al parámetro de estabilidad de interfaz [−].

Finalmente, dentro del corchete, se tiene que el primer término dentro de este muestra el subenfria-

miento solutal, donde m corresponde a la pendiente de *líquidus* del sistema [K], k corresponde al coeficiente de partición del soluto [−] y C_0 representa la concentración inicial [−], dividiéndose en el coeficiente de difusión del soluto en el líquido [m^2/s] (D_l) y el término de sobresaturación solutal adimensiona [−] (Ω_C).

El último término dentro del corchete representa el subenfriamiento térmico, con L_f calor latente de fusión [J/kg], α es la difusividad térmica [m^2/s] y c_p corresponde al calor específico [J/(kg K)].

La ecuación 1.15 indica que el crecimiento de la punta dendrítica depende del subenfriamiento de la punta, el cual está determinado por contribuciones térmicas y solutales. La acumulación de soluto frente a la punta modifica la temperatura *liquidus* local, mientras que la diferencia entre esta condición de equilibrio y el campo térmico proporciona la fuerza impulsora para el crecimiento. Este subenfriamiento constitucional se define en la ecuación 1.16.

$$T - T_f - m_l \langle C_l \rangle^{le} = \frac{L_f}{c_p}\Omega_T - m_l \langle C_l \rangle^{le} \left[1 - \frac{1}{1 - (1 - k_p)\,\Omega_C}\right] \tag{1.16}$$

Donde (Ω_T). corresponde al subenfriamiento térmico y $\langle C_l \rangle^{le}$ corresponde a la concentración promedio del líquido extra dendrítico. Este modelo es útil si se encuentra acoplado al modelo trifásico de volúmenes promedio, donde la velocidad de la punta dendrítica corresponde a la velocidad del envelope. En este sentido, el modelo muestra una relación entre el radio de la punta dendrítica y la velocidad de esta punta demostrada a nivel experimental por Yoshimura *et al.* [25] que observaron in situ el proceso de solidificación para aleaciones de estaño, mediante un haz de rayos X con el que registraron el avance del frente de solidificación obteniendo el gráfico de la Figura 1.12 que muestra que existe una correlación negativa entre la velocidad y el radio de la punta dendrítica.

La relación obtenida por Yoshimura *et al.* [25] indica que, cuando la punta avanza a mayor velocidad, también aumenta la cantidad de soluto rechazada desde la punta dendrítica hacia el líquido. Lo que aumenta la acumulación de soluto en la punta, lo que se requiere de una geometría de punta más fina que tenga mayor curvatura para que el soluto pueda difundir en varias direcciones, en lugar de concentrarse solo en el frente. Esta relación se demuestra en la ecuación 1.15.

Si bien el modelo explica la física de crecimiento,su aplicación se límita a cuando la solidificación está activa. Por esta razón, la obtención de valores experimentales se dificulta, ya que las mediciones se deben realizar a altas temperaturas y a una escala microscópica. Sin embargo, distintos investigadores han estudiado la evolución de dendritas mediante aleaciones transparentes o utilizando técnicas de caracterización avanzada como es la radiografía de sincrotrón. En particular, Neumann *et al.* [26] aplican radiografía de sincrotrón de alta resolución para obtener resultados experimentales del radio de punta durante solidificación de una aleación de Galio e Indio que se muestra en la Figura 1.13.

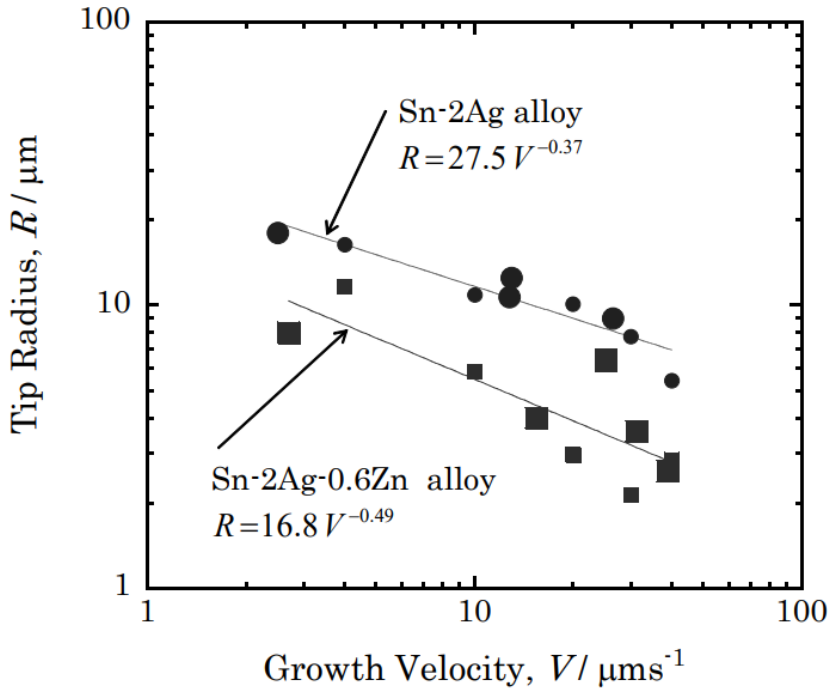


Figura 1.12: Relación entre la velocidad de crecimiento de la dendrita primaria de β-Sn y el radio de punta en las aleaciones Sn-2Ag y Sn-2Ag-0.6Zn [25].

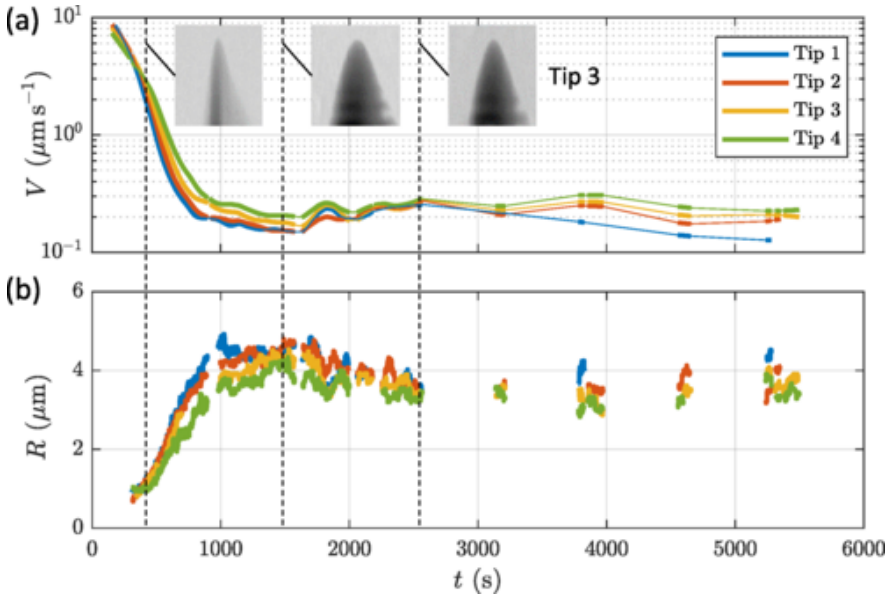


Figura 1.13: Medición de la evolución de la velocidad de punta dendrítica (a) y radio de punta dendrítica (b) en el tiempo [26].

1.6. Simulación de solidificación en WAAM

Los modelos previamente presentados sirven para representar el proceso de solidificación en un entorno virtual. En particular, en este trabajo los modelos se utilizan para representar la deposición de un cordón de soldadura en un sustrato mediante WAAM.

La simulación de procesos ha tomado gran importancia en los últimos años dada la alternativa económica que esta representa al reducir gastos experimentales. Por esto, la cantidad de investigación centrada en aplicación de modelos y predicción de propiedades, morfología, defectos y distorsiones va en aumento [27].

Asimismo, el trabajo de simulación se encuentra en la etapa de planificación de construcción de una pieza, donde se espera determinar las mejores trayectorias y estrategias de deposición para la obtención de piezas. Esta es la primera etapa y de la cual dependerán la etapa de manufactura y de posprocesamiento, como se observa en la Figura **??**.

1.6.1. Escalas de simulación

La solidificación es un fenómeno multiescala y, en consecuencia, la modelación de WAAM puede abordarse desde distintas escalas espaciales: macro, meso y micro, como se observa en la Figura 1.14. La escala macroscópica corresponde a la escala del componente manufacturado, describiendo la deposición de material, la transferencia de calor dentro de la pieza y hacia el exterior, lo que permite la predicción de tasas de enfriamiento y solidificación y microestructura esperada, mientras que la escala meso utiliza modelos que consideran fenómenos dinámicos del baño de fusión, como la formación, desprendimiento e impacto de gotas, así como comprender la evolución transitoria de la solidificación.

Finalmente, la microescala proporciona información más profunda sobre la morfología de los granos y la distribución de las fases en la pieza final, lo que influye directamente en las propiedades mecánicas, resistencia a la corrosión y ductilidad del componente fabricado, permitiendo observar el proceso de forma más detallada. Por esto las flechas rojas de la Figura 1.14 indican que si bien se evalúa una misma celda, esta puede verse desde afuera y en grande o disminuyendo la escala [28].

1.6.2. Método de Volúmenes Finitos

El Método de Volúmenes Finitos (FVM) es una técnica numérica para resolver ecuaciones diferenciales parciales muy utilizada para la simulación numérica de distintas leyes de conservación en mecánica de fluidos y transferencia de calor. Este método consiste en dividir el dominio físico en volúmenes de control o celdas, de las cuales, para cada celda se integra la ecuación resolviéndola de manera discreta mediante el teorema de Gauss donde la integral del volumen se transforma en la suma de flujos a través de las superficies que definen el volumen.

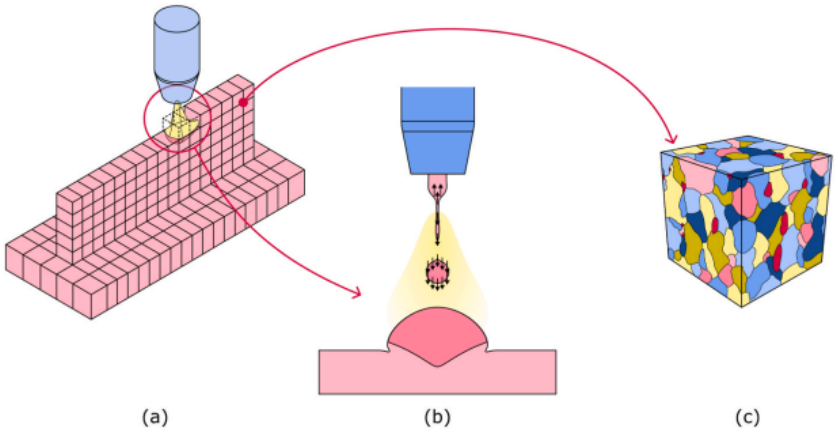


Figura 1.14: La modelación de WAAM en las tres escalas diferentes: a) macro, b) meso y c) micro [28].

En este método la suma de flujos que entran y salen a través de las caras de cada celda debe ser igual al cambio de la cantidad conservada y las fuentes internas. Esto quiere decir, que lo que sale de una celda debe entrar a la otra, no puede aparecer ni desaparecer entre las caras del volumen [29]. Por esta razón, este método es particularmente atractivo para la implementación del modelo de masa y energía, por su característica de conservación local de los flujos numéricos que lo distingue de los métodos de diferencias y elementos finitos que pudiesen no respetar la conservación.

Además, este método puede aplicarse en mallas con patrones regulares, no regulares y mallas adaptativas que se refinen según la solución, lo cual para la simulación de cordones de soldadura que pudiesen tener formas no regulares es particularmente eficiente.

1.7. OpenFOAM como plataforma de simulación

Una plataforma de simulación a utilizar es OpenFOAM, que corresponde a un software de simulación numérica de código abierto (licencia GPL) especializado en dinámica de fluidos basado en el método de volúmenes finitos útil para la implementación de modelos físicos. La ventaja de este sistema de código abierto es que permite mayor flexibilidad e implementación de nuevos modelos [30].

En este sentido, OpenFOAM corresponde a una biblioteca de C++ para crear ejecutables que incluye entornos de preprocesamiento y postprocesamiento que permite garantizar un manejo de datos, permitiéndole al usuario generar “Solvers” y “Utilities” para manipulación de datos, simulación y resolución de problemas de mecánica de medios continuos como se observa en la Figura 1.15.

Inicialmente creado como plataforma FOAM en 1989 como producto con licencia comercial fue publicado como software de código abierto bajo el nombre de OpenFOAM en 2004. OpenFOAM cuenta con un solver en el que se puede simular la transferencia de calor, mecánica de fluidos y comportamiento de la interfase para estados transitorios o estables. El programa tiene la limitante

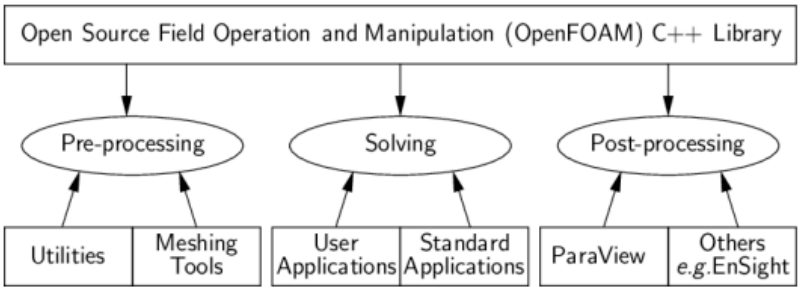


Figura 1.15: Esquema general de los diferentes componentes de OpenFOAM.

de no contar con interfaz gráfica por lo que posterior a la simulación se debe utilizar un programa de post-procesamiento como ParaView [31].

1.8. Trabajos Previos

Szyndler *et al.* [32] desarrolló una solución multiescala que combinó modelos macro y microescala para la predicción de microestructuras de una pared de acero estructural fabricada mediante WAAM. Los autores utilizaron un modelo de elemento finito en el software Simufact Welding para la obtención de historiales de temperatura y gradiente de temperatura a nivel macroscópico, los que fueron utilizados como condiciones térmicas para simular la evolución de la microestructura en el software MICRESS. De esta manera reportan resultados para 2 puntos a distintas alturas de la pared, cuyo esquema se observa en la Figura 1.16. .

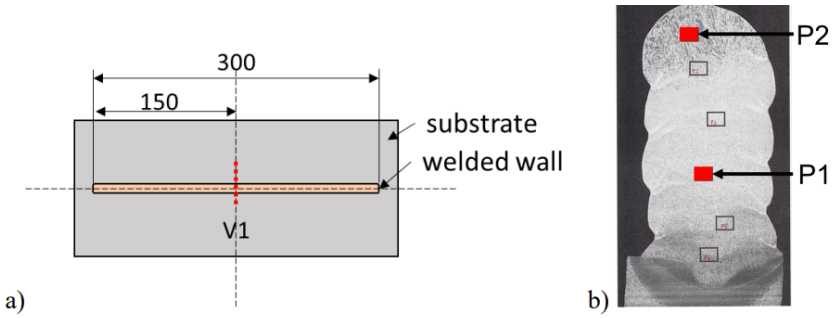


Figura 1.16: a) Esquema de Trabajo. b) Puntos de estudio de la pared [32].

A partir de los puntos estudiados P1 y P2 indicados en la Figura 1.16, se estudia la diferencia de microestructuras obtenidas para las distintas alturas de la pared. La simulación realizada para el punto P1 observadas en la Figura 1.17 muestra granos de forma equiaxial cuya variación de color sirve para representar distintos granos equiaxiales distribuidos de manera uniforme, mientras que para el punto P2 las simulaciones entregan granos más alargados, orientados de forma vertical, que corresponde a la forma de extracción de calor durante la solidificación, todos los resultados

obtenidos por la simulación se observa que son coherentes con los resultados experimentales, lo cual indica que los modelos utilizados se acercan a la realidad.

La diferencia entre las microestructuras evaluadas a distintas alturas se explica porque P2 corresponde a una de las últimas capas depositadas, donde aún se conserva la estructura de solidificación característica en estos sistemas, que consisten a granos columnares que crecen de manera preferencial en dirección contraria a la extracción de calor. Por el contrario, el punto P1, al encontrarse en una capa intermedia, experimentó múltiples ciclos de recalentamiento y enfriamiento sucesivo, lo que promovió los fenómenos de cambio microestructural por nucleación de nuevos granos por re-fusión de la capa y nucleación de nuevos granos en estado sólido a partir de los preexistentes

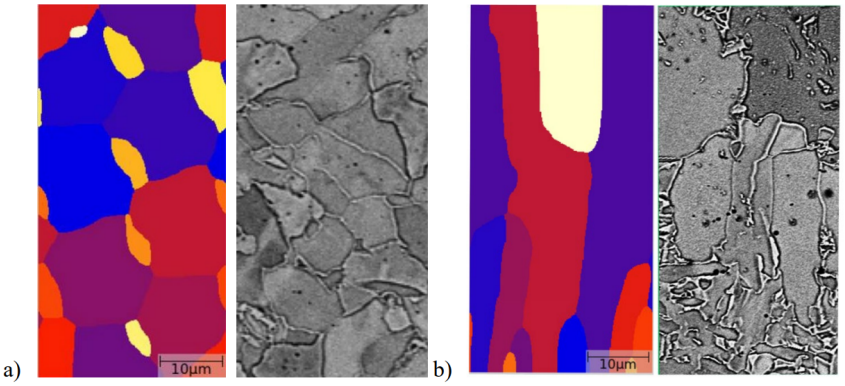


Figura 1.17: Comparación entre la simulación y la microestructura real obtenida en las ubicaciones a) P1, b) P2. Los diferentes colores hacen referencia a los distintos granos [32].

Los resultados obtenidos por Szyndler *et al.* [32] validaron de manera experimental las simulaciones realizadas, demostrando que el enfoque de simulación multiescala propuesto entrega una buena predicción cualitativa de la evolución microestructural. En este sentido, el trabajo representa un aporte importante en la simulación del proceso WAAM. Sin embargo, la limitación de este trabajo radica en el elevado costo computacional asociado al modelo de campo de fases, ya que esta modelación resuelve la evolución de la interfaz sólido-líquido a nivel microestructural, por lo que la resolución espacial debe estar a esta escala, requiriendo además pasos de tiempo del orden de $10^{-6}s$. Por lo anterior, resulta poco viable su aplicación computacional para un cordón de soldadura completo y más aún para una pared fabricada por WAAM.

Por otro lado, Chergui *et al.*[33] evalúa dos estrategias de deposición, zigzag y raster, mediante un estudio experimental y numérico, para lo cual adapta la fuente de calor tradicional de Goldak y la adapta al proceso WAAM combinándola con un modelo de deposición, construyendo la malla progresivamente, lo que le permite actualizar la geometría, las condiciones de borde y las superficies expuestas.

De esta manera, compara sus resultados de la simulación con datos experimentales medidos con termocuplas ubicadas en 6 puntos estratégicos según la Figura 1.18 y obteniendo resultados que se observan en la Figura 1.19.

Si bien las curvas simuladas son cercanas a las curvas experimentales, para la estrategia de zigzag el error llegó a un máximo 17 % para el punto P6. Demostrando una pérdida de precisión cuando la trayectoria cambia.

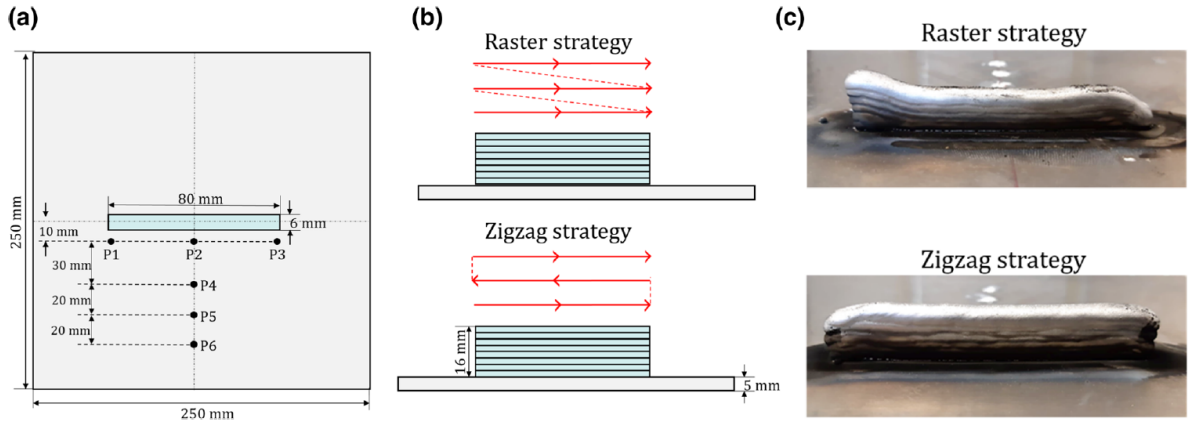
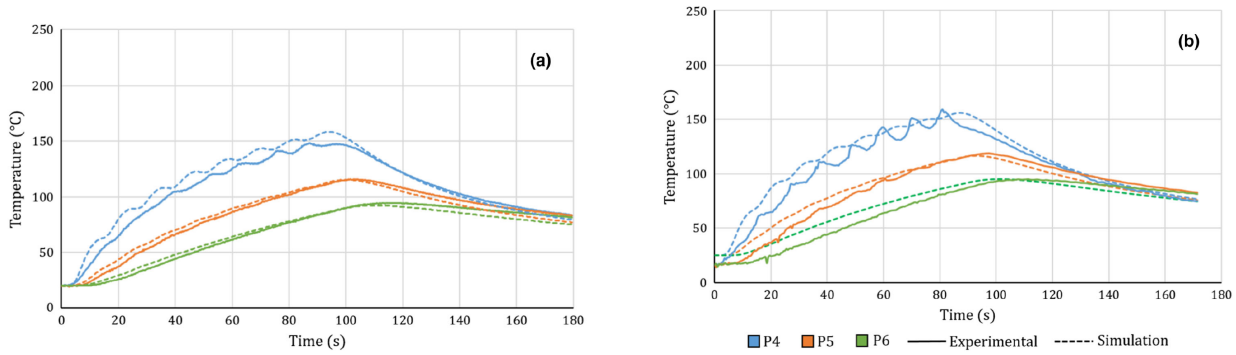


Figura 1.18: Diseño experimental: a) vista xy; b) vista xz, estrategias de barrido (raster) y en zigzag; c) piezas producidas [33].



a) Barrido b) Zigzag

Figura 1.19: Comparación de las curvas de temperatura simuladas y experimentales en los puntos P4, P5 y P6 para las estrategias de barrido (a) y zigzag (b) [33].

Chergui *et al.*[15] indican que la energía total aportada se distribuye en dos aportes: una parte se deposita como energía del arco, modelada mediante la fuente de Goldak, mientras que la otra corresponde a la energía aportada por la entalpía del metal fundido. Esta separación representa adecuadamente la física de la deposición. Sin embargo, asumen que la distribución de la energía es siempre 50 % para ambos aportes. Aunque esta aproximación reduce la complejidad del modelo, dichos porcentajes no siempre son representativos de los procesos GMAW. En este sentido, estudios como el de Haelsig *et al.*[34] indican que esta distribución varía según los parámetros operacionales, como se observa en la Figura **??** donde al variar la velocidad de alimentación del alambre, el aporte del arco y la gota varían.

Finalmente, las investigaciones en las que más se apoyó el desarrollo de este trabajo corresponden

a los propuestos por: Combeau *et al.* [35], Cisternas *et al.*[36], y Tveito *et al.* [37] quienes proponen modelos multifásicos y a multiescala para describir la solidificación.

Los antecedentes revisados muestran que, en gran parte de los enfoques multiescala, la transferencia de calor a escala macroscópica y la cinética de solidificación a escalas menores se resuelven mediante herramientas independientes, por lo que los modelos microestructurales aplicados en estos trabajos no retroalimentan el cálculo térmico. En respuesta a esta limitación, el aporte del presente trabajo consiste en integrar ambas escalas dentro de una misma formulación, de manera que la evolución de las fracciones de fase, la redistribución de soluto y la cinética de crecimiento dendrítico retroalimenten directamente el balance energético mediante el campo de temperatura que responde completamente a la cinética de solidificación.

1.9. Objetivos

1.9.1. Objetivo General:

Predecir la evolución térmica y los parámetros microestructurales asociados a la solidificación de la primera capa de una pared fabricada mediante WAAM, a partir de la integración de modelos de solidificación multiescala, balance de energía y deposición de material, adaptando y utilizando `OpenSolid`, para generar información que aporte a la planificación del proceso.

1.9.2. Objetivos Específicos:

1. Implementar y evaluar un modelo de fuente puntual para representar la deposición de energía durante la fabricación de la primera capa, comparando los ciclos térmicos simulados con resultados reportados en estudios bibliográficos.

2. Acoplar al modelo térmico un modelo de solidificación que considere la difusión de soluto y la cinética de crecimiento mediante un modelo de velocidad de punta dendrítica.

3. Comparar la evolución temporal y la distribución espacial de los parámetros térmicos y microestructurales de la primera capa de una pared fabricada mediante WAAM con distintas condiciones de aporte térmico.

Capítulo 2

Metodología

2.1. Definición de parámetros

Para la construcción del caso de simulación, se definió un dominio físico compuesto por un sustrato y un cordón sobre la superficie de este. Los parámetros geométricos y operacionales se definieron a partir de revisión bibliográfica donde se revisaron experimentos para distintos materiales y parámetros.

Se selecciona el experimento con mayor cantidad de parámetros reportados para la selección del caso base y se determinó que se simuló la fabricación del cordón a partir de un metal de aporte ER308L de 1,2 [mm] de diámetro depositado sobre un sustrato del mismo acero, con los parámetros reportados por Thao Le et al. [**?**], detallados en la Tabla 2.1.

Tabla 2.1: Parámetros de fabricación y resultados [38].

Parámetro	Resultados	
Velocidad de avance [mm/min]	Altura del cordón [mm]	Ancho del cordón [mm]
400	3,24	4,95

El cordón experimental presenta una geometría alargada en la dirección de avance con una sección transversal convexa aproximable a una forma semicircular o semi elíptica. Sin embargo, esta forma no puede ser simulada como tal, ya que el objetivo del proyecto es simular una pared fabricada con WAAM, por lo que, si se desea hacer una segunda capa, es requisito que las celdas inferiores estén completamente depositadas. Esta condición no se cumple con la forma convencional convexa de los cordones de soldadura, ya que quedarían celdas parcialmente llenadas sobre las cuales no se podría depositar material.

Para efectos de la simulación la geometría del cordón fue simplificada a una sección rectangular equivalente a la sección convexa del cordón real.Esta aproximación ha sido utilizada previamente en

modelos numéricos de WAAM con el propósito de simplificar la discretización geométrica y reducir el costo computacional. Sin embargo, este cambio de forma debe mantener constantes el volumen y la altura, cambiando únicamente el ancho real del cordón por un ancho equivalente que permita mantener el volumen constante.

Lo anterior se puede ver en la Figura 2.1 donde para que el volumen se mantenga constante la sección caracterizada de color naranjo debe tener igual volumen que la sección verde, manteniendo constante la altura (h) y el largo (l).

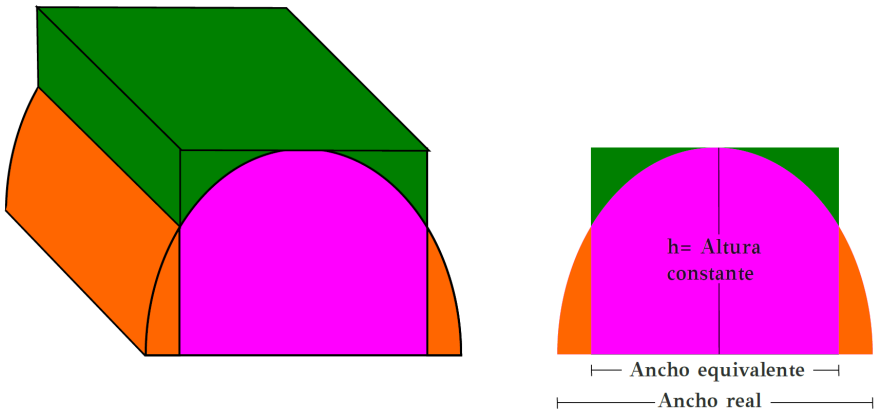


Figura 2.1: Esquema para cálculo de ancho equivalente.

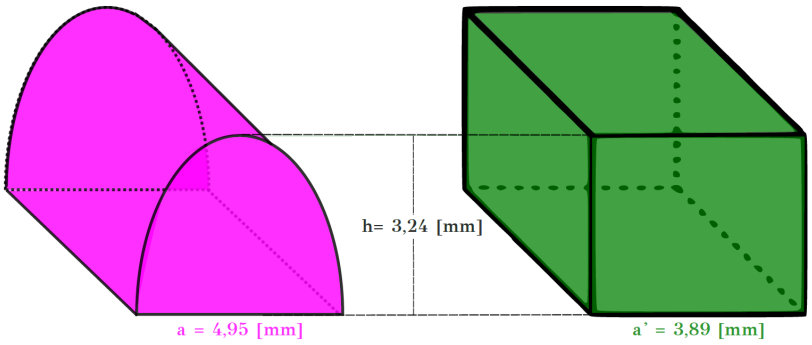


Figura 2.2: Dimensiones cordón real (rosado) y cordón para simulación (verde).

Se calcula el ancho equivalente considerando el cordón real con forma transversal de media elipse como se ve en la ecuación 2.1.

$$\frac{\pi \cdot a \cdot h}{4} \cdot l = a' \cdot h \cdot l \tag{2.1}$$

Donde a corresponde al ancho real del cordón [mm] y a' corresponde al ancho equivalente [mm]. De esta manera, se tienen las medidas del dominio físico compuesto por el sustrato de dimensiones 150 mm de largo, 100 mm de ancho y 15 mm de espesor y el cordón de sección rectangular que se

observa en la Figura 2.2 con dimensiones de ancho equivalente de 3,8 mm, altura de 3,24 mm y un largo de 80 mm.

2.2. Configuración geométrica y malla computacional

2.2.1. Generación de la geometría

Con las dimensiones del sustrato y del cordón a simular, se crea la geometría del dominio computacional con el software CAD libre y gratuito FreeCAD. Donde se dibuja inicialmente el sustrato como un rectángulo de 150 mm por 100 mm con una extrusión 15 mm. Además se dibuja el cordón con un rectángulo de 3,89 mm y 80 mm de largo con una extrusión de 3,24 mm de altura obteniendo la geometría que se observa en la Figura 2.3.

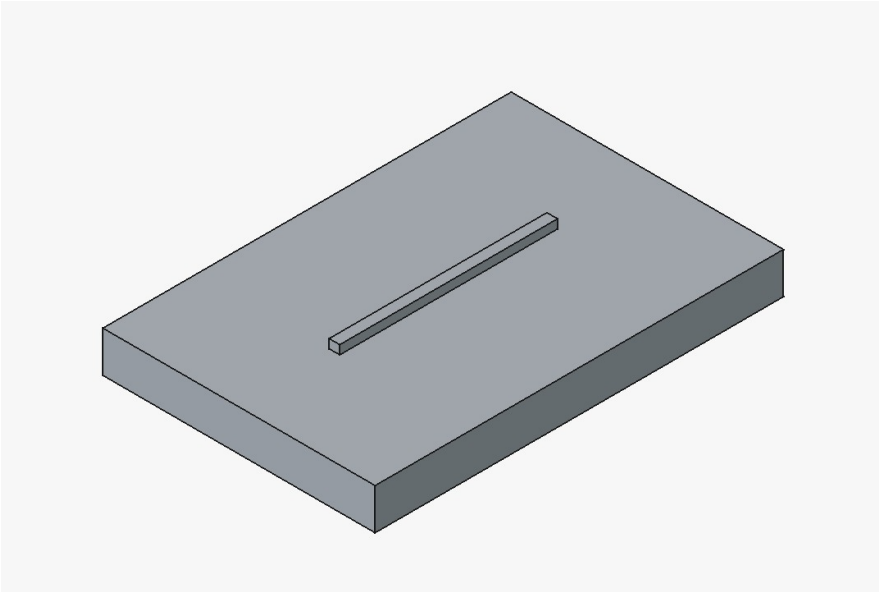


Figura 2.3: Geometría del dominio generado en FreeCAD.

2.2.2. Separación de las superficies del dominio

Posteriormente, la geometría construida en `FreeCAD` fue importada en `Gmsh` con el objetivo de generar una malla superficial, o carcasa, que describiera las diferentes superficies exteriores del dominio. Esta carcasa fue exportada en formato STL y utilizada posteriormente por `snappyHexMesh` como referencia geométrica para seleccionar, refinar y clasificar las celdas de la malla volumétrica.

Para diferenciar las regiones del dominio, las caras de la geometría fueron agrupadas mediante la definición de grupos físicos en `Gmsh`. Para ello, una vez cargada la geometría, se accedió al módulo *Geometry* y posteriormente a la opción *Physical Groups*, seleccionando *Add* y *Surface*. A

continuación, las distintas superficies fueron seleccionadas manualmente y se les asignaron nombres representativos, de acuerdo con la clasificación mostrada en la Figura 2.4.

Esta separación permite que cada región de la geometría sea reconocida posteriormente en `OpenFOAM` como un *patch* independiente. De esta manera, es posible asignar condiciones de borde específicas a las diferentes superficies del dominio y establecer distintos niveles de refinamiento de la malla en las regiones de interés.

Una vez verificada la correcta asignación de los grupos físicos, se generó una malla superficial para cada una de las regiones mediante el módulo *Mesh*, utilizando la opción de mallado bidimensional. Posteriormente, la malla superficial fue refinada mediante la herramienta *Refine by Splitting*, con el propósito de mejorar la representación de las superficies y reducir posibles errores geométricos durante la generación de la malla volumétrica.

Finalmente, las superficies fueron exportadas como archivos STL en formato ASCII. Estos archivos no corresponden a la malla de volúmenes finitos definitiva, sino que corresponden a la descripción superficial utilizada por `snappyHexMesh` para ajustar y refinar la malla de fondo generada previamente.De esta manera se exportan los distintos archivos STL ASCII, para cada superficie según la descripción de la Figura 2.4 y la Tabla 2.2.

Para ello, se ejecutó el programa desde la terminal con el comando `gmsh` y se abre el archivo de la geometría.

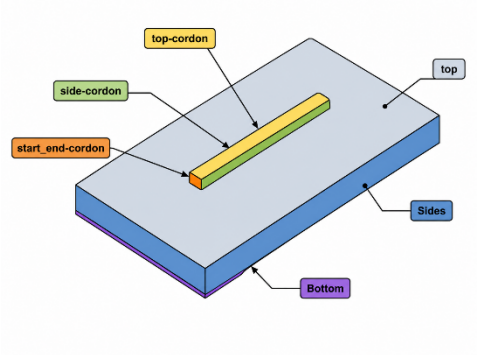


Figura 2.4: Separación de superficies del dominio.

Tabla 2.2: Descripción de separación de superficies del dominio.

Nombre del Archivo (STL)	Descripción
Bottom	Cara inferior del sustrato
Sides	Caras laterales del sustrato
side-cordon	Caras laterales del cordón
top-cordon	Cara superior del cordón
start-end-cordon	Cara de inicio y final del cordón
top	Cara superior del sustrato

Tabla 2.2: Descripción de separación de superficies del dominio.

Nombre del Archivo (STL)	Descripción

2.2.3. Generación de la malla

La malla del dominio fue generada en OpenFOAM mediante el uso combinado de `blockMesh` y `snappyHexMesh`. En primer lugar, se construyó una malla de fondo hexaédrica utilizando `blockMesh`, cuya configuración se detalla en el anexo B. En esta etapa se definieron los vértices del dominio, la cantidad de celdas en cada dirección y las dimensiones espaciales necesarias para incluir tanto el sustrato como el cordón depositado.

Esta malla de fondo corresponde al dominio inicial sobre el cual `snappyHexMesh` va a trabajar. Por lo tanto, se buscó que las celdas a lo largo de los distintos ejes coincidan con las superficies de la figura. Esto permite reducir errores de subdimensionamiento o sobredimensionamiento de la geometría durante la selección y conservación de celdas pertenecientes al dominio.

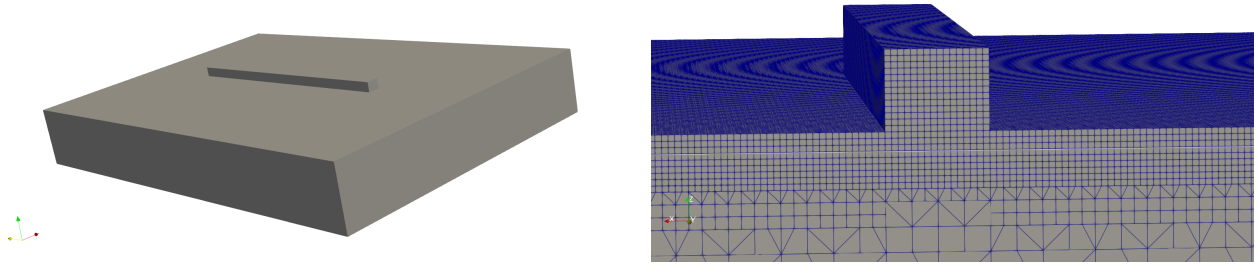
Luego, se utilizó `snappyHexMesh` para ajustar la malla de fondo a la geometría definida por los archivos STL. En este trabajo se consideró únicamente la función *castellation*, descartando las etapas de *snapping* y *layer addition*.

La etapa *snapping* de `snappyHexMesh`, no fue utilizada debido a que puede deformar las celdas para adaptarlas con mayor precisión a la geometría, lo que introduce no ortogonalidad y cambios volúmenes de las celdas, lo que afectaría los modelos matemáticos que se utilizaron para deposición de masa y de energía.

Durante la etapa de *castellation*, la malla de fondo es refinada localmente en las zonas cercanas a las superficies STL y en las regiones donde se requiere mayor resolución. En particular, se priorizó el refinamiento en la zona del cordón, debido a que en esta región se aplicaran los modelos de deposición de masa, deposición de energía y predicción de microestructura.

Finalmente, la malla resultante fue visualizada en el software libre y gratuito, ParaView, con el propósito de verificar la correcta correspondencia entre la geometría original, las superficies STL y la malla volumétrica generada.

La Figura 2.5 muestra el dominio computacional y un plano transversal de su discretización. En este plano se observa el mayor nivel de refinamiento aplicado en el cordón y en las zonas del sustrato próximas a este.



a) Dominio Computacional b) Discretización del Dominio

Figura 2.5: Creación Dominio Computacional

2.3. Modelo macroscópico

2.3.1. Modelo deposición de masa

El modelo de deposición de masa representa la incorporación progresiva del material de aporte a medida que la antorcha se desplaza a lo largo del cordón. El dominio incluye desde el inicio las celdas que posteriormente formarán el cordón. Estas comienzan vacías y son llenadas de manera progresiva cuando la posición de la antorcha alcanza su ubicación.

Para representar este proceso se define la fracción volumétrica de llenado α_f. Un valor $\alpha_f = 0$ representa una celda vacía, mientras que $\alpha_f = 1$ corresponde a una celda completamente ocupada por material. Los valores intermedios representan una ocupación parcial durante la deposición. De esta forma, la variable α_f permite representar la adición de material sin reconstruir la malla durante la simulación.

En cada paso de tiempo se identifican las celdas ubicadas en la posición instantánea de la torcha, en las cuales se deposita el flujo volumétrico aportado por el alambre distribuido uniformemente entre estas celdas definiendo la tasa de llenado volumétrico según la ecuación 2.2. Para esto, se define una fuente S_h que representa la deposición de material durante la fabricación, que depende de la velocidad de alimentación del alambre WFS en m/s,y el diámetro del alambre que define el área transversal del alambre $A_{alambre}$ en m^2 como se ve en la ecuación 2.3, donde se observa como la fracción representa un flujo volumétrico que llena cada celda.

$$\frac{\partial \alpha}{\partial t} = S_\alpha \tag{2.2}$$

$$S_\alpha = \frac{\mathrm{WFS}\, A_{\mathrm{alambre}}}{n_c\, V_{\mathrm{celda}}}. \tag{2.3}$$

Donde WFS corresponde a la velocidad de alimentación del alambre m/s, $A_{alambre}$, corresponde al

área transversal del alambre en m, n n corresponde al número de celdas activadas según la posición de la torcha y V_{celda} corresponde al volumen de cada celda m^3.

Es importante dividir este término fuente en el número de celdas activas en cada paso de tiempo, para distribuir la masa depositada de manera uniforme entre todas las celdas que se encuentren en la posición en la que se encuentra la torcha.

Si bien la torcha no fue simulada como tal, para la simulación y la activación de las celdas es importante saber la posición de esta para los distintos pasos de tiempo. De esta forma, la posición depende de la velocidad de avance de la torcha y representa una variable escalar que varía únicamente en la dirección de avance (en este caso eje y) según la Ecuación 2.4:

$$P(t) = P_0 + t \cdot v_{avance} \tag{2.4}$$

Donde, $P(t)$ corresponde a la posición de la torcha en un tiempo t, P_0 corresponde a la posición inicial de la torcha y v_{avance} es la velocidad de avance de la torcha.

Para garantizar que la fracción de llenado de las celdas, α, se mantenga dentro del intervalo entre 0 y 1 y que, al finalizar la deposición, todas las celdas correspondientes al cordón se encuentren completamente llenas, la velocidad de alimentación del alambre no se definió de manera independiente, sino que se determinó de forma consistente con la geometría objetivo del cordón. Para conservar la cantidad de material depositado, el volumen de alambre que ingresa al sistema por unidad de tiempo debe ser igual al volumen de cordón generado durante el avance de la torcha.Esto se expresa en la Ecuación 2.5, obteniendo una velocidad de alimentación del alambre, WFS, de 0,0743m/s, valor del cual depende el término fuente de deposición

$$a \cdot h \cdot v_{avance} = \pi r^2 WFS \tag{2.5}$$

Donde a corresponde al ancho equivalente en m, h a la altura del cordón en m y v_{avance} a la velocidad de avance de la torcha.

Como condición inicial, se plantea que, en $t = 0$, todas las celdas correspondientes al sustrato se encuentran completamente ocupadas con material, mientras que todas las celdas asociadas al cordón permanecen vacías, ya que la fabricación no ha comenzado. Por esto, las condiciones iniciales de la variable son:

$$\alpha(t=0) = \begin{cases} 0, & \text{celda perteneciente al cordón} \\ 1, & \text{celda perteneciente al sustrato} \end{cases} \tag{2.6}$$

Luego, para cada paso de tiempo la fracción de llenado α evoluciona según la ecuación 2.7, donde α_n corresponde a la fracción de llenado del paso de tiempo n, Δt corresponde al paso de tiempo

y $f(\alpha_n, t)$ corresponde al aumento de esta fracción volumétrica por paso de tiempo definido en la Ecuación 2.3.

$$\alpha_{n+1} = \alpha_n + \Delta t f(\alpha_n, t) \tag{2.7}$$

Para la implementación computacional del modelo, se creó el campo escalar para la variable α, llamado `alphaf`. Al crear este campo, se define que cada celda obtiene un valor de la variable escalar α calculada con el solver del programa donde se definen sus restricciones mencionadas previamente y se aplica el modelo matemático del término fuente, para el cálculo de la variación de este α en el tiempo.

2.3.2. Modelo de deposición de energía

El balance de energía indica que la variación temporal de la energía almacenada en cada celda está determinada por la transferencia de calor por conducción y por el aporte energético asociado al término fuente, según la Ecuación 2.8.

$$\frac{\partial}{\partial t}\left(\alpha\rho\langle h\rangle\right) = \nabla \cdot (\alpha k \nabla T) + S_h \tag{2.8}$$

Donde $\langle h\rangle$ corresponde a la entalpía promedio de las fases del material, α corresponde a la fracción de material de la celda calculada con el modelo de deposición de masa, ρ corresponde a la densidad, k corresponde a la conductividad térmica, T corresponde a la temperatura y S_h es el término fuente que modela la deposición de energía. La entalpía promedio esta definida por la fracción de líquido (g_l), fracción de sólido (g_s), la entalpía del líquido (h_l) y la entalpía del sólido según la Ecuación 2.9:

$$\langle h\rangle = g_l h_l + g_s h_s \tag{2.9}$$

La energía depositada (S_h) se modela de forma puntual al igual que la masa, donde el aporte energético se deposita celda por celda asumiendo que la torcha se encuentra dentro de los distintos volúmenes de control. Si bien en la realidad la torcha deposita energía de manera distribuida más semejante al modelo de Goldak, se implementó el modelo puntual de la Ecuación 2.10. Esta elección se realizó principalmente debido a su facilidad de implementación y de acoplamiento con el modelo de masa puntual, ya que el modelo de Goldak, describe la distribución espacial de la energía sobre un dominio que ya contiene material, pero no representa por sí mismo la incorporación de masa. Por lo tanto, su aplicación al proceso WAAM requiere complementarlo con una estrategia de deposición de material compatible con la extensión espacial de la fuente.

El modelo puntual establece que el aporte energético total entregado por la torcha está asociado

principalmente a la potencia eléctrica del arco, la cual depende de la corriente, el voltaje y la eficiencia térmica del proceso. Sin embargo, no toda la energía generada por la torcha esta disponible en el líquido, ya que parte de esta es utilizada en calentar y fundir el material de aporte. Esto se expresa en la Ecuación 2.10 donde el primer término corresponde al aporte energético total y el segundo término corresponde a la energía consumida y por lo tanto se aplica en la ecuación como un término negativo.

$$S_h = \eta IV - \dot{m}\left[C_p\left(T_m - T_0\right) + L_f\right] \tag{2.10}$$

Donde η es la eficiencia, I es la corriente, V es el voltaje, $\dot{m}$ es el flujo másico, C_p corresponde al calor específico, T_m corresponde a la temperatura *liquidus* y T_0 es la temperatura inicial y L_f es el calor latente. Los parámetros se aplican en unidades internacionales, cuyos valores se pueden ver en la Tabla 2.3:

Tabla 2.3: Propiedades proceso GMAW con ER308L.

Parámetro	Valor	Unidad
Eficiencia	0,8	-
Flujo másico	$6{,}59 \cdot 10^{-4}$	kg/s
Calor específico	480	J/kgC
Temperatura *Liquidus*	1536	C
Temperatura ambiente	25	C
Calor latente	$2,7 \cdot 10^5$	J/kg

Con los parámetros, se determina el valor de la fuente de calor. Esta energía fuente se aplica al líquido para calentarlo hasta su temperatura de deposición (T_{dep}) como se muestra en la Ecuación 2.11:

$$S_h = \dot{m}\left[C_p\left(T_{dep} - T_m\right)\right] \tag{2.11}$$

De esta manera se calcula la temperatura de deposición del plasma, con la cual se calcula la entalpía promedio a partir de su definición planteada en la ecuación 2.9. Para efectos comparativos, se simularán dos casos con distinto calor de aporte, aplicando para cada caso las entalpías de deposición calculadas presentadas en la Tabla 2.4.

2.3.3. Balances macroscópicos de predicción microestructural

El modelo trabaja con un enfoque Euler-Euler, el cual considera las distintas fases como campos continuos, donde para cada celda se calcula la fracción de cada fase y se observa la evolución de las

Caso de estudio	Voltaje[V]	Corriente[A]	Calor de Aporte[J/mm]	Entalpía de deposición calculada J/Kg
Bajo HI	17	100	204	$2,076 \cdot 10^6$
Alto HI	23	140	386	$3,921 \cdot 10^6$

Tabla 2.4: Temperaturas máximas alcanzadas para los distintos calores de aporte

propiedades en promedio. De esta forma, considerando modelos utilizados Cisternas [36] se plantean modelos de solidificación a los cuales se les realizan simplificaciones, proponiendo modelos que no consideran el movimiento del líquido ni el movimiento de granos equiaxiales.

2.3.4. Balance de masa de una fase k

El balance de masa explica que la tasa de transformación de una fase depende de qué tan rápido esta nuclee y crezca, en este sentido, para cualquier fase el balance viene dado por la Ecuación (2.12).

$$\frac{\partial}{\partial t}\left(\rho_k \alpha g_k\right) = \alpha\left(\Gamma_k + \Phi_k\right) \tag{2.12}$$

Donde ρ_k corresponde a la densidad de la fase, g_k corresponde a la fracción de la fase, Γ_k corresponde a la tasa de crecimiento de la fase y Φ_k corresponde a la aparición/desaparición de la fase debido a nucleación de granos.

2.3.5. Balance de soluto de las fases

La distribución de soluto durante la solidificación se describe mediante un modelo trifásico de la Figura 1.10 que distingue la fase sólida, el líquido intradendrítico y el líquido extradendrítico. En el caso estudiado, ambas velocidades son nulas, debido a que no se considera el movimiento del líquido. Además, se desprecia la derivada material de la concentración de soluto en la región intradendrítica. De esta manera, la concentración promedio de soluto en la fase líquida se relaciona con las concentraciones de las regiones intra- y extradendrítica según la ecuación 2.13.

$$g_l \left\langle C_l \right\rangle^l = g_{li} C_l^* + g_{le} \left\langle C_l \right\rangle^{le}, \tag{2.13}$$

Donde el primer término del lado derecho representa el contenido de soluto en el líquido intradendrítico, cuya concentración se considera igual a la concentración de equilibrio en la interfase, mientras que el segundo término corresponde al contenido de soluto en el líquido extradendrítico.

El balance macroscópico de soluto para la fase sólida se expresa como:

$$\frac{\partial}{\partial t}\left(\alpha_f g_s \rho_s \langle C_s \rangle^s\right) = \alpha_f \left[\Gamma_s k_p C_l^* + \frac{\rho_s S_v^s D_s}{\delta_s}\left(k_p C_l^* - \langle C_s \rangle^s\right) + \Phi_s k_p \langle C_l \rangle^l\right]. \tag{2.14}$$

Donde cada término a la derecha de la ecuación representa las distintas formas en las que el soluto se agrega a la fase sólida.

Tabla 2.5: Términos de la ecuación de conservación de soluto en la fase sólida

Término	Explicación
$\Gamma_s k_p C_l^*$	Representa el soluto que incorporado a la fase por el crecimiento de esta.
$\frac{\rho_s S_v^S D_s}{\delta_s}\left(k_p C_l^* - \langle C_s \rangle^s\right)$	Corresponde a la difusión microscópica de soluto.
$\Phi_s k_p \langle C_l \rangle^l$	Corresponde al soluto que incorporado al solido por nucleación granos.

Así mismo, se define el balance de soluto para la fase líquida:

$$\frac{\partial}{\partial t}\left(\alpha g_l \rho_l \langle C_l \rangle_l\right) = -\alpha \left[\Gamma_s C_l^* + \frac{\rho_l S_v^e D_l g_l}{g_{le}\delta_e}\left(C_l^* - \langle C_l \rangle_l\right) - \Phi_s k_p \langle C_l \rangle_l\right]. \tag{2.15}$$

Donde g_sy g_l corresponden a las fracciones volumétricas de sólido y líquido, respectivamente; g_{le} representa la fracción de líquido extradendrítico; ρ_sy $\rho_l$son las densidades de las fases sólida y líquida; $\langle C_s \rangle^s$y $\langle C_l \rangle^l$ corresponden a las concentraciones promedio del soluto en las fases sólida y líquida; $\Gamma_s$es la tasa de crecimiento de sólido; $k_p$es el coeficiente de partición; $C_l^\star$es la concentración de equilibrio del soluto en el líquido en la interfase sólido-líquido; S_v^Sy S_v^eson áreas interfaciales específicas; D_sy $D_l$son los coeficientes de difusión en sólido y líquido; δ_sy $\delta_l$son longitudes características de difusión; y Φ_s corresponde al término fuente asociado a la nucleación de granos.

Este modelo se encuentra acoplado al balance energético de la Ecuación 2.16 mediante la relación lineal de la temperatura con la concentración en el equilibrio, por lo que, al tener una temperatura conocida, se puede conocer la concentración de soluto en la interfase.

$$T = T_f + m_l C_l^\star \tag{2.16}$$

En la Ecuación 2.15, se observa que los términos asociados al crecimiento y a la nucleación presentan signo negativo. Esto se debe a que el soluto incorporado a la fase sólida por efecto del crecimiento de grano y la nucleación proviene de la fase líquida, por lo que estos mecanismos representan una pérdida de soluto para esta fase. Además, los modelos conservan la concentración total de soluto, ya que el soluto rechazado por una fase se distribuye en las demás regiones consideradas por el modelo. A diferencia de los modelos de Scheil y de regla de la palanca, en los cuales el camino de solidificación queda determinado principalmente por hipótesis de equilibrio y difusión, en el presente modelo la evolución de las concentraciones y de las fracciones de fase depende de la cinética de solidificación.

2.3.6. Modelo de nucleación y conservación de núcleos

El modelo explica la activación de distintos tipos de núcleos, los cuales pueden activarse a distintos subenfriamientos. Estos núcleos que se activan pueden corresponder a fragmentos desprendidos de la zona columnar, partículas inoculantes o impurezas. El modelo de conservación presentado en la Ecuación 2.17 describe la evolución temporal de la densidad volumétrica de núcleos. Por otra parte, el modelo de activación de núcleos indicado en la Ecuación 2.17 establece que los núcleos de una clase j se activan cuando el subenfriamiento de la celda supera el subenfriamiento crítico para la nucleación de núcleos tipo, según la ecuación.

Aunque la formulación general permite utilizar diferentes clases de núcleos, cada una asociada a un subenfriamiento crítico, en el presente trabajo se consideró una única clase. Los núcleos se activan cuando la temperatura local alcanza la temperatura *liquidus* correspondiente a la composición del líquido, por lo que el subenfriamiento crítico asignado a esta clase es $\Delta T_n = 0$.

$$\frac{\partial N^j}{\partial t} = \dot{N}^j \tag{2.17}$$

Donde $\dot{N}^j$ representa la tasa de activación de núcleos correspondiente a la clase j; N^j corresponde a la densidad volumétrica de núcleos disponibles de la clase j; $\delta(t)$ representa la función delta de Dirac, utilizada para describir la activación instantánea de los núcleos; ΔT corresponde al subenfriamiento local; y ΔT_n^j representa el subenfriamiento crítico de nucleación requerido para activar los núcleos de la clase j.

2.4. Descripción microscópica de crecimiento de granos

2.4.1. Modelo trifásico de distribución de soluto

Para describir el crecimiento microestructural, se utiliza nuevamente el modelo trifásico dendrítico de la Figura 2.6, describiendo a nivel microscópico el balance de soluto en la interfase entre la fase sólida y el líquido intradendrítico. Este balance permite calcular la tasa de solidificación Γ_s, relacionando el soluto rechazado durante el avance de la interfase sólido-líquido con los flujos difusivos que ocurren tanto en el líquido como en el sólido.

Para la aplicación de este modelo Tveito et al. [37] demostró que la variación de la concentración de soluto en la interfase puede despreciarse sin representar un error significativo del balance.

$$\Gamma_s(1-k_p)C_l^* = \rho_l S_v^e D_l \frac{C_l^* - \langle C_l \rangle_e}{\delta_e} + \rho_s S_v^s D_s \frac{C_s^* - \langle C_s \rangle_s}{\delta_s}. \tag{2.18}$$

Donde Γ_s corresponde a la tasa de crecimiento o transformación hacia la fase sólida; k_p representa el coeficiente de partición del soluto entre la fase sólida y líquida; y C_l^* corresponde a la concentración

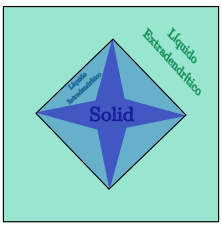


Figura 2.6: Representación de un grano en el modelo trifásico de volumen promedio con superficies Octaédricas.

de equilibrio del soluto en el líquido en la interfase sólido-líquido, ρ_s corresponde a la densidad de la fase sólida, S_v^Sal área interfacial específica entre el sólido y el líquido intradendrítico, $D_s$al coeficiente de difusión del soluto en el sólido, C_s^*a la concentración de equilibrio del soluto en el sólido en la interfase sólido-líquido, $\langle C_s \rangle^s$a la concentración promedio del soluto en la fase sólida, y δ_sa la longitud característica de difusión en el sólido.

El lado izquierdo de la ecuación representa la cantidad de soluto rechazada por la interfase durante el crecimiento de la fase sólida. El rechazo de soluto por la interfase ocurre porque el soluto tiene menor solubilidad en la fase sólida, por lo tanto, cuando esta fase crece, una fracción de soluto se incorpora al sólido y el resto se redistribuye en el líquido.

El primer término del lado derecho corresponde al flujo difusivo de soluto en la fase líquida, este término representa el transporte de soluto desde la interfase hacia el líquido extradendrítico. Finalmente, el segundo término del lado derecho representa el flujo difusivo de soluto en la fase sólida, que considera la redistribución de soluto dentro del sólido debido a la diferencia entre la concentración de equilibrio en la interfase sólida, $C_s^{*,i}$, y la concentración promedio del soluto en la fase sólida, $\langle C_s \rangle^{s,i}$.

Esta ecuación acopla la cinética de solidificación con los modelos de distribución de microestructura que a su vez se encuentran acoplados a los modelos de deposición de energía. El modelo trifásico aplicado en la simulación considera la envolvente de grano como un octaedro cuya área superficial viene dada por la Ecuación 2.19.

$$S_v^e = 4\sqrt{3}R^2 N_g \tag{2.19}$$

Donde la longitud promedio de una arista del grano se calcula según la Ecuación 2.20.

$$R = \sqrt[3]{\frac{3g_e}{4N_g}} \tag{2.20}$$

Por otro lado, el área superficial del sólido se modela con la Ecuación 2.21, utilizada por Cisternas et al. [36].

$$S_v^s = \frac{4}{\lambda_2}\sqrt{g_i g_e}\,(1 - g_i^m) + g_i^m S_v^e \tag{2.21}$$

Donde S_v^S corresponde al área superficial específica del sólido, asociada al área de interfase sólido-líquido por unidad de volumen; $\lambda_2$representa el espaciamiento de brazos dendríticos secundarios; g_i corresponde a la fracción de sólido dentro de la envolvente del grano representada por la Ecuación 2.22.

$$g_i = \frac{g_s}{g_e} \tag{2.22}$$

2.4.2. Modelo de velocidad de punta dendrítica

Para calcular el radio y la velocidad de la punta dendrítica se empleó el modelo de Lipton–Glicksman–Kurz para una punta dendrítica paraboloidal, presentado en la Sección 1.5.4.

Sin embargo, la aplicación de este modelo no puede aplicarse por sí solo ya que cuenta con 2 incógnitas, donde los términos de sobresaturación son función también de estas 2 variables. Para esto, se presentó el modelo de subenfriamiento de la punta dendrítica, que representa el balance entre el subenfriamiento disponible en el líquido y los aportes térmicos y solutales que ocurren en la punta dendrítica, según la ecuación 2.23.

$$T - T_f - m_l \langle C_l \rangle^{le} = \frac{L_f}{c_p}\Omega_T - m_l \langle C_l \rangle^{le}\left[1 - \frac{1}{1 - (1 - k_p)\,\Omega_C}\right] \tag{2.23}$$

En esta expresión, el término $T - T_f - m_l\langle C_l\rangle^{le}$representa el subenfriamiento disponible, que corresponde a la diferencia entre la temperatura local T y la temperatura *liquidus* asociada a la concentración del líquido extradendrítico. Donde T_f corresponde a la temperatura de fusión del componente puro, $m_l$es la pendiente de la línea *liquidus* y $\langle C_l \rangle^{le}$ es la concentración promedio intrínseca de soluto en el líquido extradendrítico.

El primer término de la derecha representa la contribución térmica al subenfriamiento, es decir la liberación del calor latente que debe transportarse hacia los alrededores para que la punta pueda seguir creciendo. Donde L_f es el calor latente de fusión, c_p el calor específico y Ω_T la sobresaturación térmica adimensional calculada con los número adimensionales de Peclet, Peclet convectivo y Reynolds según la ecuación 2.24.

$$\Omega_T = F\,(Pe_T, Pu_T, Re_T) \tag{2.24}$$

Por otra parte, el segundo término del lado derecho representa la acumulación de soluto adelante de la punta dendrítica. Donde k_p corresponde al coeficiente de partición y Ω_C a la sobresaturación

solutal , calculada según la Ecuación 2.25.

$$\Omega_C = F\left(Pe_C, Pu_C, Re_C\right) \tag{2.25}$$

Las Ecuaciones 2.24 y 2.25 se resuelven considerando que el número de Peclet convectivo Pu es 0, dado que para la simulación no se está considerando convección dentro del líquido.

$$F\left(Pe, Pu, Re\right) = 2Pe \int_1^\infty \exp[-\ln(\eta) + \left(1 - \eta^2\right)]d\eta \tag{2.26}$$

Donde, cada número se calcula según la Tabla 2.6

Tabla 2.6: Parámetros adimensionales utilizados para los campos térmico y solutal.

Parámetro	**Campo térmico**	**Campo solutal**
Número de Péclet asociado al crecimiento	$Pe_T = \frac{R_{\text{tip}} V_{\text{tip}}}{2\alpha}$	$Pe_C = \frac{R_{\text{tip}} V_{\text{tip}}}{2D_l}$
Número de Prandtl o Schmidt	$Pr = \frac{c_p \mu_l}{k_l} = \frac{\nu_l}{\alpha}$	$Sc = \frac{\mu_l}{\rho_l D_l} = \frac{\nu_l}{D_l}$
Número de Reynolds modificado	$Re_T = \frac{Pe_T + Pu_T}{Pr}$	$Re_C = \frac{Pe_C + Pu_C}{Sc}$
Simplificación sin convección	$Re_T = \frac{Pe_T}{Pr}$	$Re_C = \frac{Pe_C}{Sc}$

La velocidad de punta dendrítica permite obtener la tasa de crecimiento del envelope a partir de la Ecuación 2.27, acoplando el modelo cinético a los modelos de distribución de soluto nuevamente.

$$\Gamma_e = \frac{1}{\sqrt{3}} S_v^e V_{tip} \tag{2.27}$$

2.4.3. Longitudes de difusión

Para la aplicación del modelo trifásico se determinaron las longitudes de difusión según lo propuesto por Bedel et al. [39], cuyo conjunto de ecuaciones se encuentra en el anexo C.

El modelo original considera envolventes esféricas, por lo que para aplicar el conjunto de ecuaciones propuesto en un sistema con envolventes son octaédricas, se utilizó el radio equivalente de la envolvente calculado a partir de la Ecuación 2.28 y con este se calculó la velocidad de avance de la interfase del grano a partir de la Ecuación 2.29.

$$R_{env} = \sqrt[3]{\frac{3g_e}{4\pi N_g}} \tag{2.28}$$

$$V_g = \frac{1}{\pi}\frac{R}{R_{env}^2}V_{tip} \tag{2.29}$$

La Ecuación 2.29 acopla el modelo cinético de velocidad de punta dendrítica, con el cálculo de las longitudes de difusión necesarias para el modelo de distribución de soluto trifásico que a su vez se encuentra acoplado al modelo de deposición de energía mediante la Ecuación 2.16.

2.5. Acoplamiento de Modelos y resolución de ecuaciones

La resolución de los modelos presentados se realizó mediante el método de volúmenes finitos, es decir, para cada volumen de control se resuelven todos los modelos y ecuaciones planteadas. Para esto la entalpía presentada calculada inicialmente, corresponde a un parámetro inicial entregado a la simulación, considerando que toda la masa depositada en el cordón corresponde a fase únicamente líquida.

Para describir el proceso, el superíndice n representa el paso de tiempo y el superíndice p corresponde a la iteración interna realizada en cada paso de tiempo hasta la convergencia de resultados.

Al inicio del paso temporal $t^n \rightarrow t^{n+1}$, el programa utiliza como condición inicial los campos convergidos del paso anterior, incluyendo la entalpía, la temperatura, las fracciones de fase, la densidad de granos y las concentraciones promedio de soluto. Así, inicialmente se resuelve el balance de energía, considerando la conducción térmica y la fuente de calor, obteniendo la entalpía promedio y la temperatura local de cada celda.

Luego, se evalúan las condiciones de nucleación a partir del subenfriamiento local. Para esto el programa activa núcleos de distinto tipo (pueden ser por inoculantes, por el sustrato u otro dependiendo de lo que se quiera agregar) y en caso de que se cumpla con el subenfriamiento necesario, se activan núcleos y se actualiza la densidad volumétrica de granos según la Ecuación 2.31, la tasa de producción másica de sólido por nucleación según la ecuación , la fracción de sólido según la Ecuación 2.32 y la fracción de envolvente según la ecuación 2.34 para la cual se asume que cuando se forma el núcleo la envolvente de esta se encuentra completamente sólida.

$$\Phi_s = \rho_s V_0 \dot{N} \tag{2.30}$$

$$N_g^{\text{nucl}} = N_g^n + \dot{N}\Delta t \tag{2.31}$$

$$g_s^{\text{nucl}} = g_s^n + \frac{\Phi_s}{\rho_s}\Delta t \tag{2.32}$$

$$g_l^{\text{nucl}} = 1 - g_s^{\text{nucl}} \tag{2.33}$$

$$g_e^{\text{nucl}} = g_e^n + \frac{\Phi_s}{\rho_s}\Delta t \tag{2.34}$$

Así, el programa resuelve la etapa de crecimiento, se calculan inicialmente las fracciones de líquido intradendrítico y extradendrítico, las áreas interfaciales específicas a partir de la densidad volumétrica de granos. Luego el programa parte con valores de radio y velocidad de punta estimados o de la iteración anterior y resuelve el sistema de Ecuaciones formado por el modelo de velocidad de punta **??** y el modelo de subenfriamiento de la punta 2.23, resolviendo el sistema no lineal de 2 Ecuaciones y 2 incógnitas iterando hasta que los resultados convergan obteniéndose el radio de punta R_{tip} y la velocidad de punta V_{tip}. A partir de las variables obtenidas, el programa puede calcular la tasa de crecimiento de la envolvente y las longitudes de difusión, pudiendo calcular la tasa de crecimiento del sólido con el balance de soluto y de energía. Con las tasas calculadas en la iteración p, se obtienen valores de las fracciones sólida y de envolvente:

$$g_s^{p+1} = g_s^{\text{nucl}} + \frac{\Gamma_s^p}{\rho_s}\Delta t, \tag{2.35}$$

$$g_e^{p+1} = g_e^{\text{nucl}} + \Gamma_e^p \Delta t. \tag{2.36}$$

A partir de las nuevas fracciones se vuelve a calcular la fracción líquida, la distribución del soluto, la concentración de equilibrio en la interfase, las áreas específicas, las longitudes de difusión y la temperatura asociada al calor latente de solidificación. Debido a que estas variables intervienen nuevamente en los balances de soluto y en los modelos de crecimiento, las tasas Γ_s y Γ_e se vuelven a calcular.

Este procedimiento se repite dentro del mismo paso de tiempo hasta que las variaciones de las fracciones de fase y de las concentraciones entre dos iteraciones consecutivas son menores que las tolerancias numéricas establecidas por el programa (del orden de 10^-6). Es importante señalar que las iteraciones internas no representan nuevos intervalos físicos de tiempo, sino correcciones sucesivas de la solución correspondiente al mismo Δt. Por esta razón, cada estimación se calcula con respecto al estado posterior a la nucleación y no se suma sobre la estimación de la iteración anterior.

Una vez alcanzada la convergencia, los valores calculados se aceptan como solución del paso t^{n+1} y se utilizan como condición inicial para el siguiente paso temporal. En consecuencia, la tasa de crecimiento sólido no permanece constante durante la simulación, sino que se recalcula tanto dentro

de las iteraciones de cada paso de tiempo como al avanzar al paso temporal siguiente, de acuerdo con las nuevas condiciones térmicas, químicas y geométricas de cada celda como se ve en el esquema.

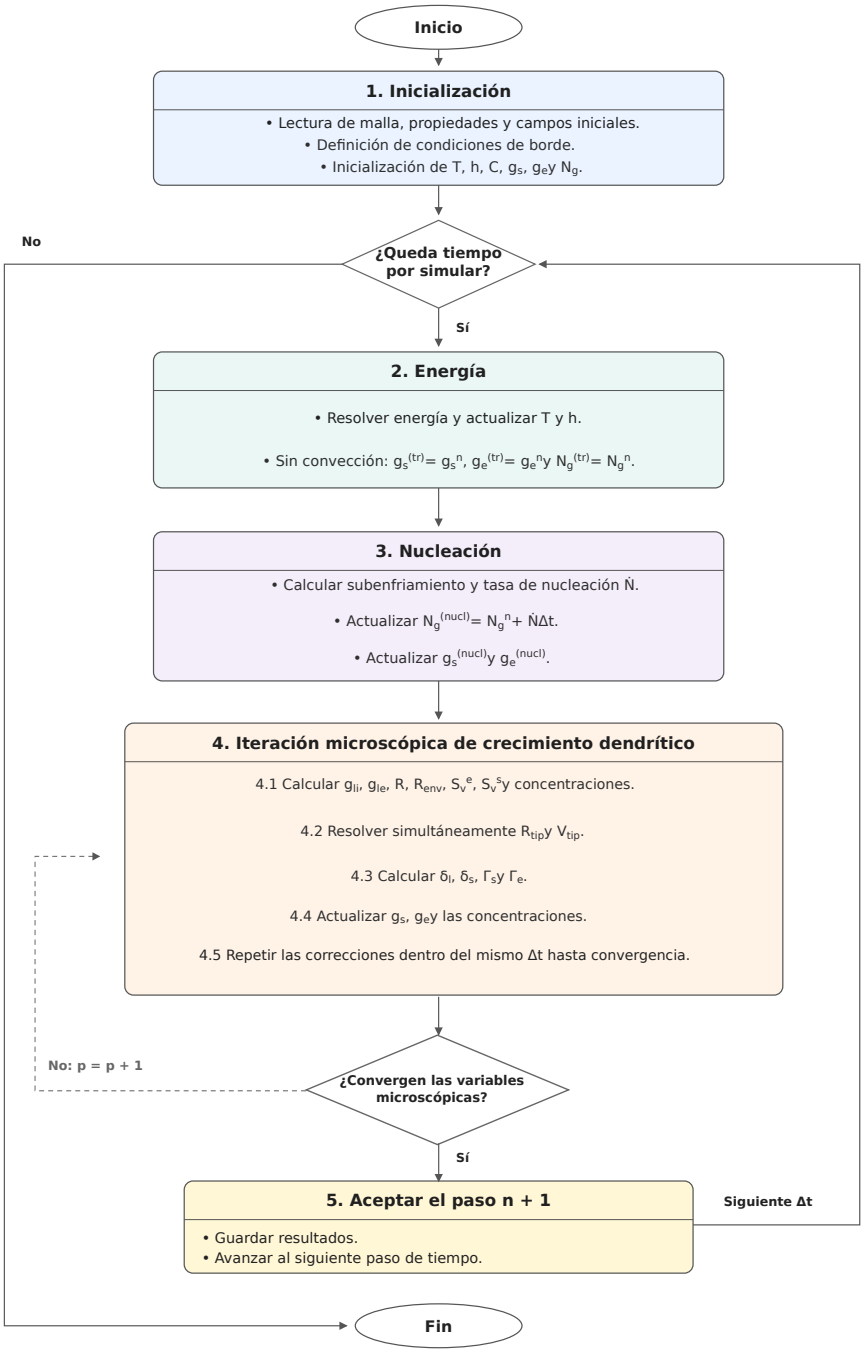


Figura 2.7: Esquema de funcionamiento del modelo multiescala

Capítulo 3

Resultados y Discusión

3.1. Efecto del aporte térmico sobre el comportamiento de la temperatura

Con las simulaciones planteadas, se seleccionaron cuatro puntos ubicados en el centro del cordón y distribuidos a lo largo de la dirección de avance. En estos puntos, la simulación registra las variables $h, g_s, T, R_{tip}, V_{tip}$ en cada paso de tiempo, lo que permite obtener una mayor resolución temporal de los resultados. En el resto del dominio, aunque las propiedades se calculan para cada paso de tiempo, los campos completos se almacenan únicamente a intervalos de 0,2$[s]$.

Aunque se obtuvieron resultados para los cuatro puntos analizados, todos presentaron tendencias y valores numéricos muy semejantes. Por esta razón, el análisis de la evolución temporal se realizó utilizando únicamente uno de ellos, considerado representativo del comportamiento observado.

3.1.1. Temperaturas máximas y velocidades de enfriamiento

A partir de los gráficos de la Figura 3.1, se observa que al aumentar el calor aportado durante la soldadura, se obtiene una curva de temperatura con menor pendiente.

En este sentido, la evolución de la temperatura en el tiempo obtenida por las gráficas concuerda con las tendencias reportadas en literatura, como por ejemplo las curvas reportadas por Turichin et al. [40] demuestran que mayores Q, aumentan la temperatura máxima alcanzada y disminuyen la tasa de enfriamiento.

Si bien la evolución temporal de las curvas presenta la tendencia esperada, las temperaturas máximas obtenidas se encuentran considerablemente sobreestimadas. Esta diferencia se atribuye principalmente al modelo puntual del término fuente de energía. En el modelo, la potencia disponible se incorpora en un número reducido de celdas donde se deposita el material, generando una concentra-

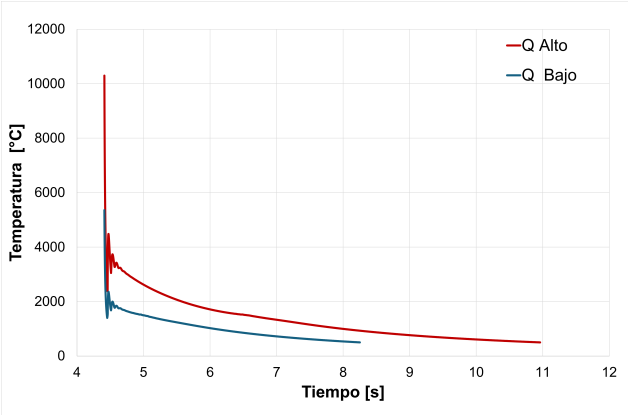


Figura 3.1: Perfil de temperatura vs tiempo

ción local de energía. En el proceso real, en cambio, la energía del arco se distribuye espacialmente sobre el baño fundido y el sustrato. Por lo tanto, la formulación puntual utilizada produce máximos locales de temperatura superiores a los esperables físicamente, aunque posteriormente la conducción redistribuya parte de esta energía hacia el resto del dominio.

Calor de Aporte$[W]$	Temperatura máxima registrada $[°C]$
1360	5357
2576	10296

Tabla 3.1: Temperaturas máximas alcanzadas para los distintos calores de aporte

Para evitar esta sobreestimación, se plantea como perspectiva futura a este trabajo aplicar el modelo de Goldak que distribuya la energía y acoplarlo al modelo microestructural, esta aplicación se revisa luego en la sección de Alcances y límitaciones del proceso.

3.1.2. Distribución espacial de la temperatura

Las Figuras 3.2 y 3.3 presentan el perfil de temperatura a lo largo del eje transversal al cordón para los distintos valores de aporte térmico. Para esto, la escala de temperatura se restringió al intervalo entre $738°C$ y $1530°C$, ya que se quiere analizar la longitud de la Zona Afectada Termicamente (ZAT). De esta forma, los resultados muestran que al aumentar el calor de aporte, HI, celdas más lejanas al cordón lograrán alcanzar la temperatura crítica, por lo que la ZAT aumenta su tamaño.

La importancia de la ZAT en soldadura se debe a la modificación microestructural que ocurre en esta zona, lo que afecta las propiedades mecánicas. En las zonas más próximas al metal fundido, las elevadas temperaturas pueden producir crecimiento de grano, mientras que en regiones más alejadas pueden ocurrir transformaciones de fase, precipitación de carburos o modificaciones de las fases presentes. Asimismo, el calentamiento y enfriamiento no uniforme generan contracciones

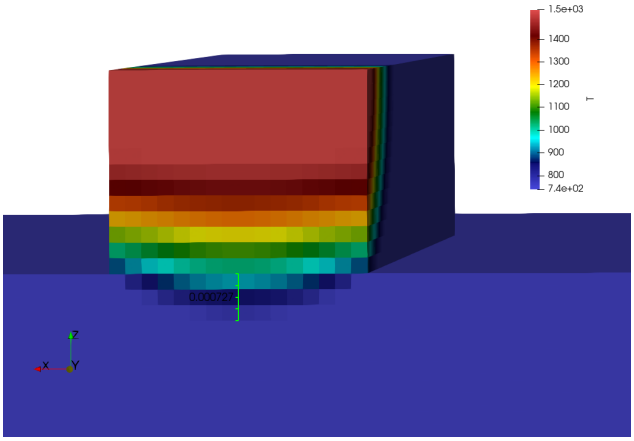


Figura 3.2: Distribución ZAT a los 8 [s] para un bajo calor de aporte

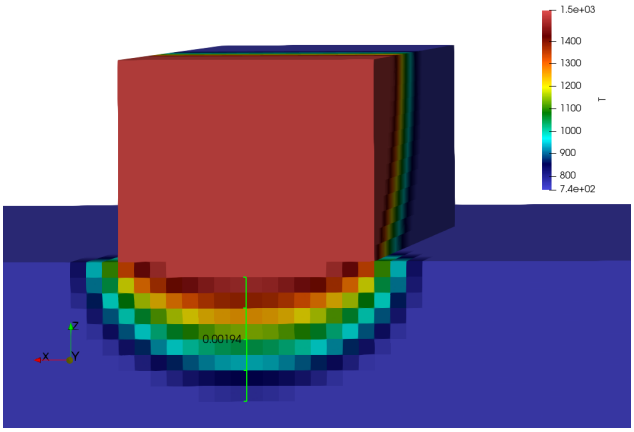


Figura 3.3: Distribución ZAT a los 8 [s] para un alto calor de aporte

diferenciales, tensiones residuales y distorsión. Por lo anterior, se prefiere el calor de aporte que genere ZAT pequeñas, para lograr un acero más homogéneo, más tenaz y menos propenso a fallar de forma frágil. Estas ZAT más pequeñas se logran con el bajo calor de aporte.

3.2. Efecto del aporte térmico sobre las fases

3.2.1. Evolución temporal del sólido

En la Figura **??** se presenta la evolución temporal de la fracción sólida para las condiciones de bajo y alto calor de aporte. Estas gráficas permiten analizar la cinética de solidificación y la respuesta de los modelos microscópicos utilizados en la simulación. Para los dos casos analizados se presentan el mismo comportamiento de las curvas, solo que para el caso de alto calor de aporte las curvas se desplazan a tiempos mayores debido a las menores tasas de enfriamiento propuestas anteriormente.

Inicialmente se muestra una región gris, en la que la fracción sólida toma valores del orden de 10^{-7} a 10^{-4}, esta etapa corresponde al inicio de la solidificación, cuando la nucleación ya ha comenzado. Sin embargo, los núcleos formados poseen un área interfacial disponible para el intercambio de soluto muy pequeña. En consecuencia, los términos asociados al crecimiento y al transporte interfacial de soluto inicialmente son limitados, por lo que el aumento de g_s se encuentra dominado por la nucleación. Cuando aumenta el área interfacial de los granos, el crecimiento dendrítico se activa y la fracción sólida comienza a aumentar rápidamente.

Luego de centésimas de segundo, se activa el crecimiento de los granos y la fracción sólida aumenta rápidamente, dando origen a la zona con pendiente elevada destacada en verde. Esta región coincide con los valores máximos de dg_s/dt observados en la Figura 3.4, debido a que la formación de sólido se debe al aporte del avance de la envolvente, g_e, y del engrosamiento de las ramas dendríticas.

Cuando la fracción sólida alcanza valores cercanos a 0,22, la velocidad de punta dendrítica se hace 0, por lo que el avance espacial de la envolvente se detiene y se produce una caída en la tasa de formación de sólido, como se observa en la Figura 3.4. A partir de este punto, las curvas muestran pendientes menores observables en la zona delimitada en rosado en la Figura **??**. En esta etapa, el incremento de la fracción sólida depende principalmente del engrosamiento de las ramas dendríticas, ya que la contribución asociada al avance de sus puntas desaparece. Este comportamiento se mantiene estable hasta alcanzar una fracción sólida del orden de 0,9. Luego, las curvas ingresan al régimen celeste, donde la pendiente disminuye considerablemente y dg_s/dt toma valores cercanos a cero. Esto ocurre debido a la disminución de la cantidad de líquido remanente y a su enriquecimiento en soluto, lo que dificulta la solidificación por la disminución de su Temperatura *líquidus* causada por las altas concentraciones de soluto.

Finalmente, para fracciones sólidas muy próximas a la unidad, se observa un nuevo incremento de la tasa de solidificación, asociado a la transformación del líquido residual enriquecido en soluto y a la solidificación de las últimas regiones eutécticas.

Si bien las curvas presentan el mismo comportamiento, la solidificación requiere de mayores tiempos cuando el calor de aporte es mayor. Esto se observa en la Figura 3.4 que muestra que para un mayor calor de aporte se alcanzan menores tasas de formación de sólido dg_s/dt.

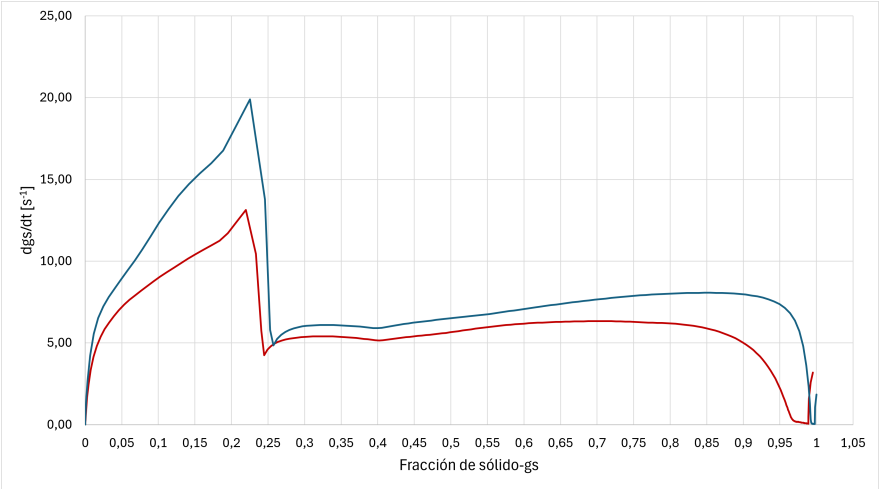


Figura 3.4: Evolución de la tasa de fracción de sólido en el tiempo

La menor tasa de formación de sólido obtenida para el caso de alto aporte térmico se relaciona con su menor velocidad de enfriamiento, ya que como el material se mantiene a temperaturas más elevadas durante más tiempo, se desarrolla un menor sobreenfriamiento. Esto reduce la fuerza impulsora disponible para la solidificación y disminuye la velocidad de crecimiento dendrítico y, en consecuencia, la tasa de transformación hacia la fase sólida. Por esta razón, el aumento de g_s ocurre de manera más lenta y la solidificación completa se desplaza hacia tiempos mayores.

3.2.2. Distribución espacial del soluto

En las Figuras 3.5 y 3.6 se presenta la distribución de temperatura, temperatura *líquidus* y la concentración de carbono en el líquido a lo largo del segmento blanco orientado en la dirección de avance, ubicado en el centro de la cara superior del cordón.

En ambos casos se observa que, a medida que disminuye la fracción líquida, la concentración de carbono en el líquido remanente aumenta debido a la distribución del soluto durante la solidificación. Como se describió en la Sección1.5 la solubilidad del carbono es diferente en las fases sólida y líquida, por esto a medida que el sólido crece una fracción del soluto es rechazada y se acumula en el líquido al frente a la interfase. A medida que la solidificación avanza, el volumen de líquido es cada vez menor, por lo que el soluto rechazado por el sólido se va concentrando en el líquido, por lo que hay un menor gradiente de soluto y una mayor concentración en el líquido que se encuentra frente a la interfase.

El aumento de la concentración de soluto produce una disminución de la temperatura *liquidus* local. Por esta razón, en ambas condiciones de calor de aporte se observa una reducción de la temperatura *liquidus* conforme disminuye g_l. El líquido enriquecido en carbono puede permanecer en estado líquido a temperaturas inferiores a la temperatura *liquidus* asociada a la composición inicial de la aleación, esto favorece la inestabilidad del frente y estructuras dendríticas.

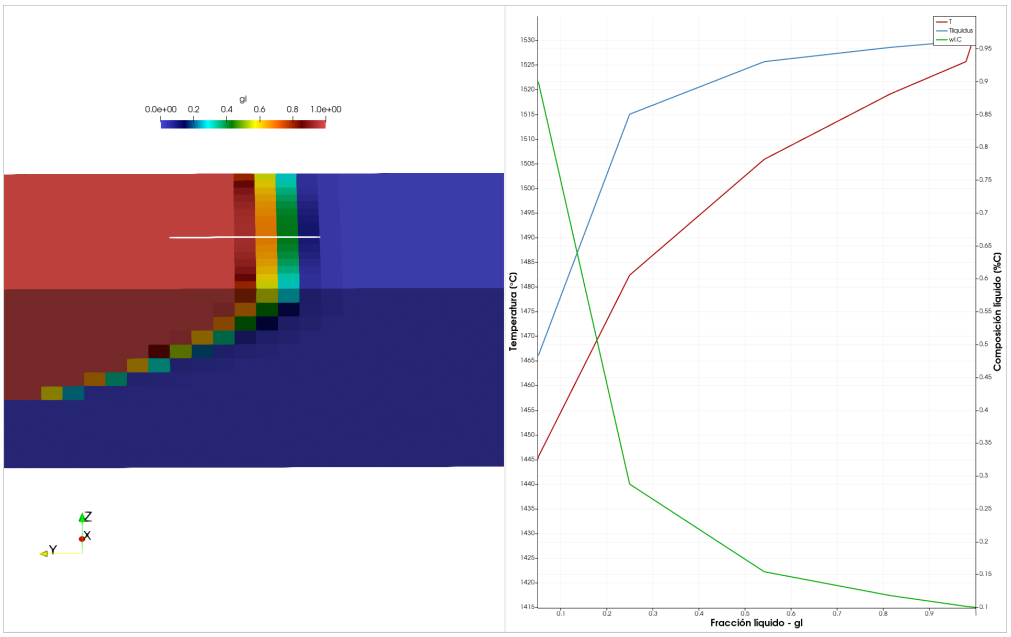


Figura 3.5: Distribución de soluto para HI bajo en un tiempo de 8 [s]

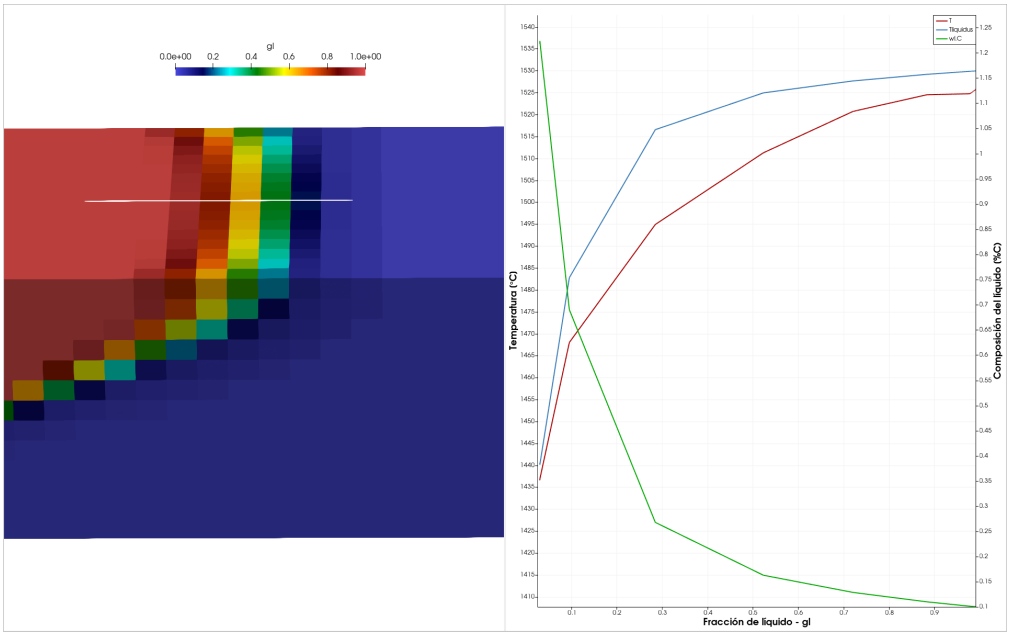


Figura 3.6: Distribución de soluto para HI alto en un tiempo de 8 [s]

El sobreenfriamiento local puede estimarse mediante la diferencia entre la temperatura *liquidus* correspondiente a la composición local del líquido y la temperatura real del material, según la Ecuación 3.1

$$\Delta T = T_{liquidus} - T \tag{3.1}$$

Cuando $T < T_{liquidus}$, el líquido se encuentra sobreenfriado respecto de su temperatura local de equilibrio. Por esto, mientras mayor sea la separación entre las curvas de temperatura *líquidus* y temperatura real, mayor la fuerza impulsora termodinámica disponible para la solidificación, la nucleación y el crecimiento de nuevas estructuras dentro del líquido.

Al comparar ambas condiciones, se observa para un menor calor de aporte existe una mayor separación entre las curvas de temperatura local y la temperatura *liquidus*, lo que indica un mayor sobreenfriamiento que favorece la activación de sitios de nucleación. Esto también explica por qué en la Figura 3.4 la tasa de solidificación es mayor para menor calor de aporte.

Sin embargo, el sobreenfriamiento constitucional no determina por sí solo la morfología final de los granos. Bajo un régimen de crecimiento dendrítico, la transición entre crecimiento columnar y equiaxial depende de la competencia entre el gradiente térmico, la cinética de crecimiento dendrítico y la disponibilidad y activación de núcleos equiaxiales. Así, el modelo implementado permite describir la cinética local de crecimiento de las dendritas, pero no determina explícitamente la transición entre granos columnares y equiaxiales. Por esto, se plantea como trabajo futuro la incorporación de un modelo de transición columnar-equiaxial, conocido como modelo CET (Columnar-to-Equiaxed Transition), que permita predecir la evolución espacial de ambas morfologías durante la solidificación.

3.3. Efecto del aporte térmico sobre la cinética dendrítica

3.3.1. Velocidad de punta dendrítica

La presentación de los resultados de velocidad de punta dendrítica se muestra en la Figura 3.7, donde se distingue que un mayor calor de aporte genera una menor velocidad máxima de $0,0295[m/s]$, respecto del caso de menor calor de aporte cuya máxima es de $0,0409[m/s]$. Esto tiene sentido, ya que las tasas de enfriamiento son mayores para menores calores de aporte, lo que favorece solidificaciones más rápidas.

La Figura 3.8 complementa este análisis mediante la evolución de la temperatura durante la solidificación en el intervalo en que V_{tip} permanece activa. Para fracciones sólidas muy cercanas a cero, del orden de 10^{-5}, la solidificación se encuentra en el régimen de nucleación, por lo que la velocidad de punta es 0, lo cual que ocurre a fracciones muy pequeñas de sólido. Sin embargo, cuando este régimen cambia, aunque g_s sigue teniendo valores muy pequeños, el modelo de crecimiento de punta se activa y V_{tip} aumenta de manera rápida hasta alcanzar su valor máximo.

En el mismo intervalo, el comportamiento de la temperatura es inverso, ya que cuando se activa V_{tip}, la variación de temperatura comienza disminuir su pendiente, generando una meseta en la curva. Esta meseta indica una reducción de la tasa de enfriamiento hasta que cuando V_{tip} alcanza su valor máximo, la temperatura llega a un mínimo local y cambia su tendencia comenzando a aumentar la

temperatura. Este comportamiento se debe al aumento de la tasa de fracción de sólido, que indica que hay un mayor volumen de líquido que está solidificando, por lo que el cambio de un estado de mayor energía a uno de menor energía, esta energía se libera en forma de calor latente y esta energía liberada puede compensar el enfriamiento al que se está sometiendo el cordón aumentando unos pocos grados la temperatura de manera temporal.

A medida que V_{tip} disminuye, también lo hace la pendiente positiva de la temperatura, lo que indica que la recalescencia deja de dominar el balance de energía, hasta que poco después de que V_{tip} se hace nula, la temperatura retoma su tendencia de enfriamiento.

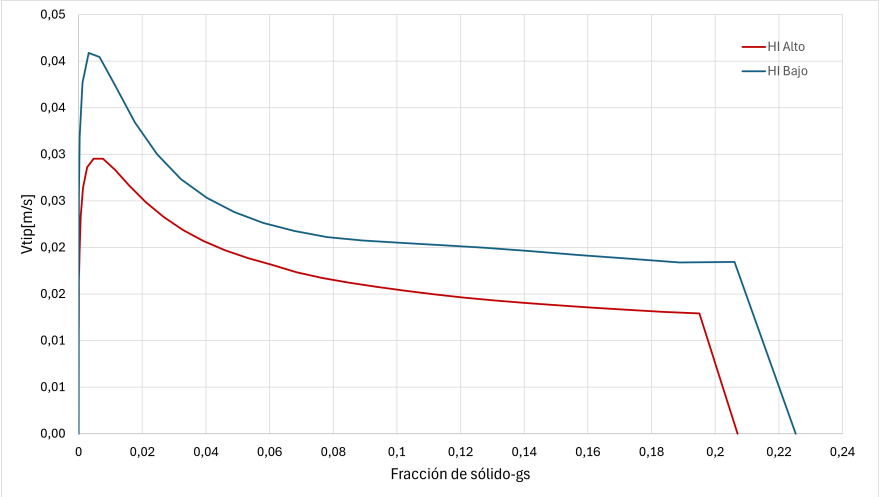


Figura 3.7: Evolución de la velocidad de punta durante la solidificación

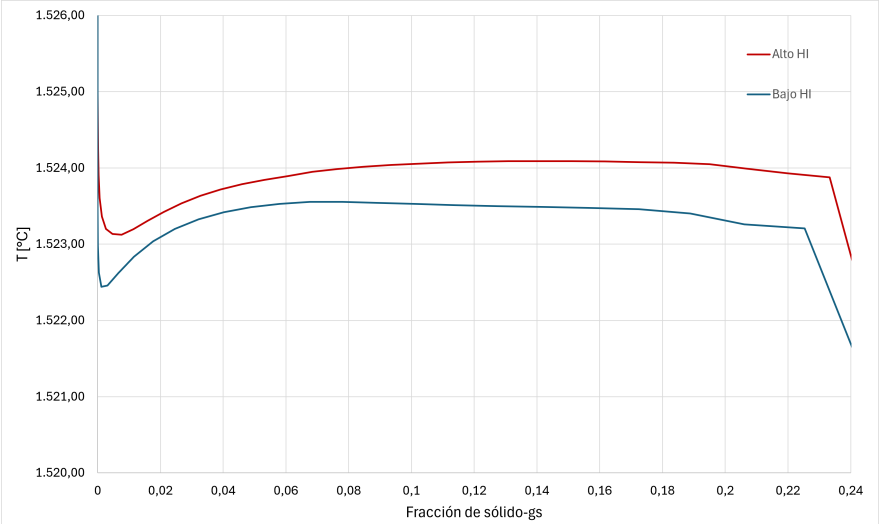


Figura 3.8: Evolución de la temperatura durante la solidificación

Ahora bien, ya que el modelo de punta permanece activo para pequeñas fracciones de sólido, tendremos que el sobreenfriamiento constitucional para un bajo calor de aporte es de unos 25°C , mientras que para un alto calor de aporte tendremos un sobreenfriamiento constitucional de 15 °C. Bedel et

al. [39] reporta que para mayores sobreenfriamientos la velocidad de la punta aumenta, lo cual es concordante con lo obtenido.

3.3.2. Radio de punta dendrítica

La Figura 3.9 presenta la evolución del radio de punta dendrítica durante la solidificación, para las condiciones de bajo y alto calor de aporte. Los resultados muestran que la condición de mayor calor de aporte alcanza un radio máximo de 1,2[μm] mayor al obtenido para el menor calor de aporte de 0,7[μm]. Este comportamiento es físicamente consistente, ya que como la tasa de enfriamiento disminuye debido al aumento del calor de aporte, existe mayor tiempo para el crecimiento y engrosamiento de las puntas dendríticas. Por el contrario, bajo condiciones de enfriamiento más rápido, el crecimiento ocurre en intervalos más breves, favoreciendo la formación de puntas de menor radio y mayor curvatura.

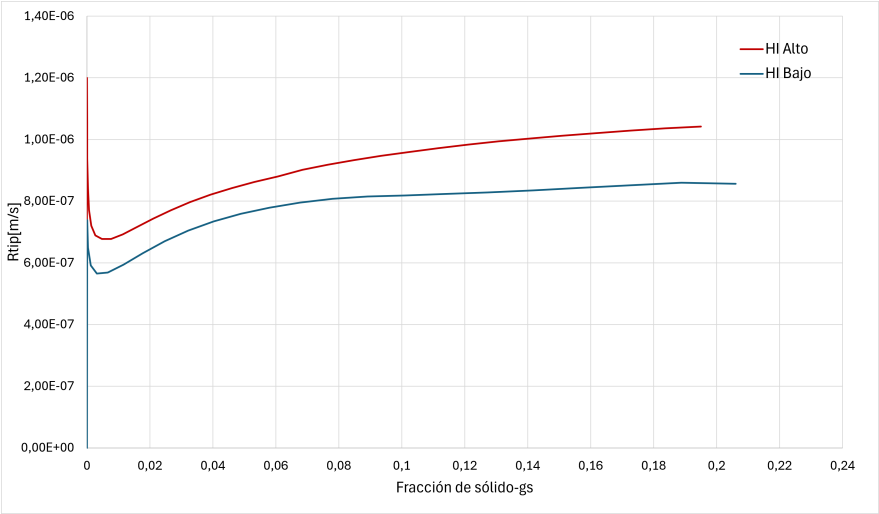


Figura 3.9: Evolución del radio de punta dendrítica durante la solidificación

3.3.3. Relación entre velocidad y radio de punta

La Figura 3.10 muestra la relación entre la velocidad y el radio de la punta dendrítica obtenidos a partir de la simulación, evidenciando que el radio de punta disminuye a medida que aumenta la velocidad de crecimiento. Esta tendencia es consistente con los resultados reportados por Yoshimura et al.[25], mostrados en la Figura 1.12.

Este comportamiento demuestra la influencia de la distribución de soluto sobre la cinética de crecimiento dendrítico. Al aumentar la velocidad de la punta dendrítica, el soluto rechazado dispone de menos tiempo para difundir hacia el líquido extradendrítico. Si este soluto se acumulara únicamente delante de la punta, la sobresaturación solutal aumentaría y el subenfriamiento podría no ser suficiente para mantener la velocidad.

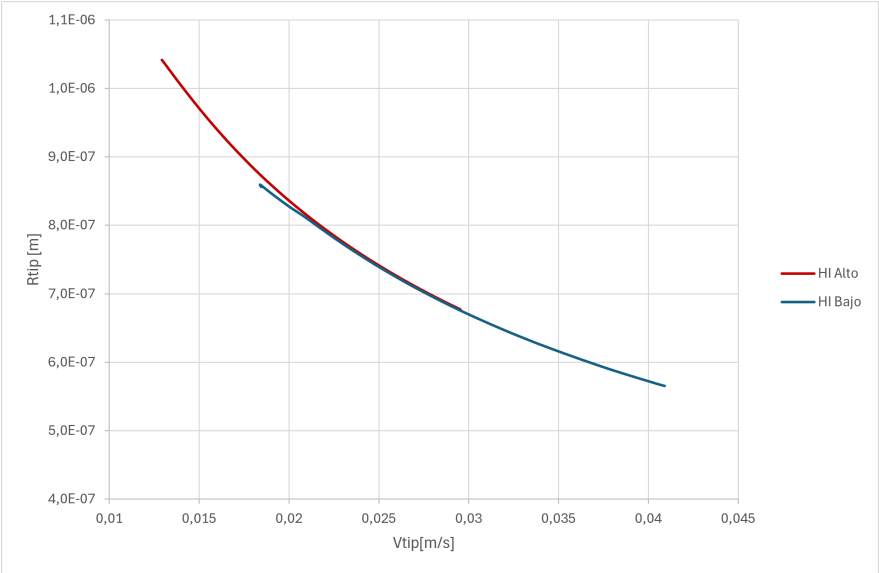


Figura 3.10: Relación entre el Radio de punta y la Velocidad de punta

En este sentido, un menor radio de punta aumenta la curvatura de la interfase, generando una geometría de punta más aguda y favoreciendo una distribución más tridimensional donde el soluto rechazado puede distribuirse tanto hacia la región frontal como lateralmente alrededor de la punta dendrítica, en lugar de concentrarse exclusivamente por delante de ella.

Por lo anterior, el criterio de selección de punta dendrítica relaciona mayores velocidades de crecimiento con menores radios de punta. No obstante, la combinación de estas variables depende de las condiciones de difusión térmica y solutal, del subenfriamiento disponible y del coeficiente de Gibbs–Thomson.

Lo anterior, también explica el comportamiento de la velocidad de punta durante la solidificación, ya que esta velocidad según la figura x, muestra un aumento pronunciado en las etapas iniciales de la solidificación, hasta llegar a un máximo, para luego disminuir de manera progresiva.

Este comportamiento se asocia al acercamiento entre las envolventes dendríticas, ya que en un inicio estos nucleos tienen harto líquido para crecer. Sin embargo,una vez que las envolventes crecen, el volumen de líquido extradendrítico disponible disminuye y aumenta su concentración, lo que disminuye la diferencia de concentración entre la interfase y el líquido. Esto reduce el gradiente que impulsa la difusión de soluto, por lo que el avance de la punta requiere un mayor subenfriamiento para sostenerse, disminuyendo su velocidad de crecimiento disminuye.

3.4. Efecto del aporte térmico sobre la distribución espacial de la solidificación

3.4.1. Extensión de la Mushy Zone

La distribución espacial de la fracción de sólido, permite identificar la zona de transición entre el líquido y el sólido que corresponde a la zona pastosa o Mushy Zone. Como se observa en las figuras 3.11 y 3.12 esta zona alcanza espesores de hasta 3 [mm] para el caso de alto calor de aporte (Figura 3.12) y disminuye a 1 [mm] para el caso de bajo calor de aporte según la Figura 3.11.

Estos resultados no se alejan de los valores reportados por Liang et al.[41] de espesores de $1-2[mm]$ o Zhang et al. [42] que reporta espesores de hasta 3 [mm]. Sin embargo, el espesor obtenido podría encontrarse parcialmente sobreestimado por la concentración de energía asociada a la fuente puntual, ya que como el modelo lo plantea, toda la energía va únicamente al líquido, no considerando el calor utilizado en calentar y fundir el sustrato, calentar gases, etc.

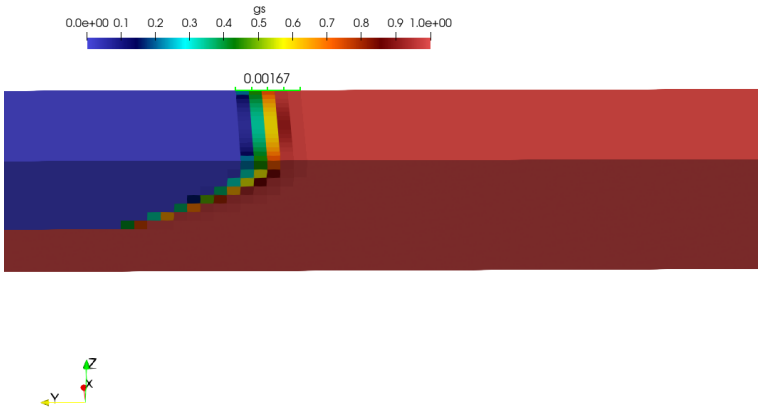


Figura 3.11: Zona Pastosa para bajo HI en un tiempo de 8 [s]

Las figuras presentadas demuestran una relación entre el aumento del calor de aporte y la extensión de la zona pastosa. Esta variable es importante durante la etapa de planificación del proceso, ya que en esta región puede producirse el agrietamiento en caliente, fenómeno que ocurre durante las últimas etapas de la solidificación, cuando el líquido restante que queda entre los brazos dendríticos puede no ser suficiente para compensar la contracción volumétrica asociada a la formación del sólido. Como consecuencia, se pueden formar microrechupes entre las ramas dendríticas que sometido a esfuerzos pueden generar agrietamiento en caliente.

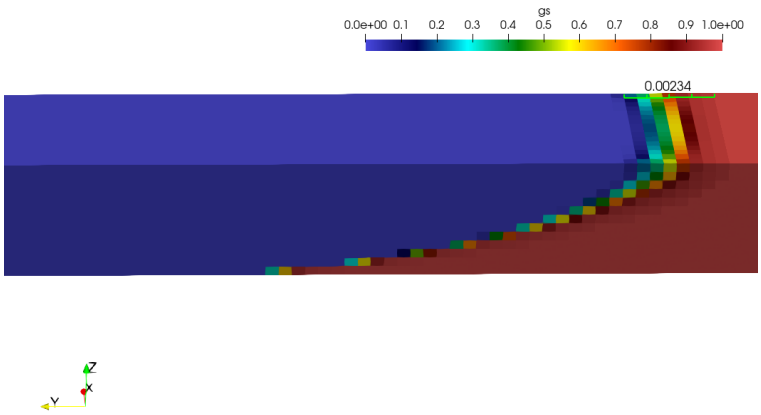


Figura 3.12: Zona Pastosa para alto HI en un tiempo de 8 [s]

3.4.2. Distribución del radio de punta y globularidad

Lo anterior también demuestra el comportamiento anómalo del radio de punta para el caso de bajo calor de aporte, donde el radio se hace 0 para las zonas un poco inferiores al centro del cordón y a su vez la globularidad es 1. Esto demuestra que dados los altos gradientes térmicos la solidificación ocurre netamente por nucleación, por lo que todo el envelope que se genera corresponde únicamente a la fracción sólida nucleando. Esto genera una globularidad de 1 representando un crecimiento planar que no le da paso a que la física del modelo de punta paraboloide se active, por lo que nunca se calculan valores de R_{tip} o V_{tip} en esas celdas, lo que hace que Rtip sea 0 en todo tiempo durante solidificación.

En las Figuras 3.13 y 3.14 se presenta la distribución espacial del radio de punta dendrítica, R_{tip}, la globularidad, g_i, y el gradiente térmico, G_T. En el caso de alto calor de aporte se observa que a medida que las celdas se acercan al sustrato, el radio de punta dendrítica disminuye, mientras que la globularidad y el gradiente térmico aumentan.

Esta anisotropía a lo largo de la altura del cordón cordón puede deberse al uso de una fuente de calor puntual, la cual genera diferencias pronunciadas de temperatura entre el material depositado y el sustrato, causando elevados gradientes térmicos en la zona cercana al sustrato y menores gradientes para la zona superior del cordón.

En términos del modelo, valores de g_i cercanos a cero se asocian con una envolvente mucho mayor a la fracción sólida interna, característica de una morfología más ramificada o dendrítica. Por el contrario, cuando esta se aproxima a uno, la fracción sólida y la fracción de envolvente alcanzan

valores similares, lo que representa una morfología más compacta y compatible con un frente de solidificación planar. De esta forma, la relación $g_i = g_s/g_e$ también aumenta en las regiones próximas al sustrato, representando una morfología de solidificación más compacta con un crecimiento más planar.

Esta tendencia es coherente con los modos de solidificación descritos por Sindo Kou [11] para un cordón de soldadura.Donde, hacia el interior de la piscina líquida, las condiciones térmicas y de sobreenfriamiento favorecen la transición hacia morfologías dendríticas, caracterizadas en este caso por menores valores de globularidad.

Para la condición de bajo aporte térmico se observa un comportamiento particular en las regiones cercanas a la interfaz entre el cordón y el sustrato, donde R_{tip} y V_{tip} permanecen iguales a cero, mientras que g_i alcanza valores cercanos a la unidad. En estas regiones, los altos gradientes térmicos hacen que el modelo implementado deje de entregar una solución válida, por lo que el cálculo de R_{tip} y V_{tip} se desactiva. Como consecuencia, la evolución inicial de g_s y g_e queda dominada por la contribución asociada a la nucleación y ambas fracciones presentan valores similares, generando $g_i \approx 1$. Por lo tanto, este comportamiento corresponde a una limitación del rango de aplicación del modelo.

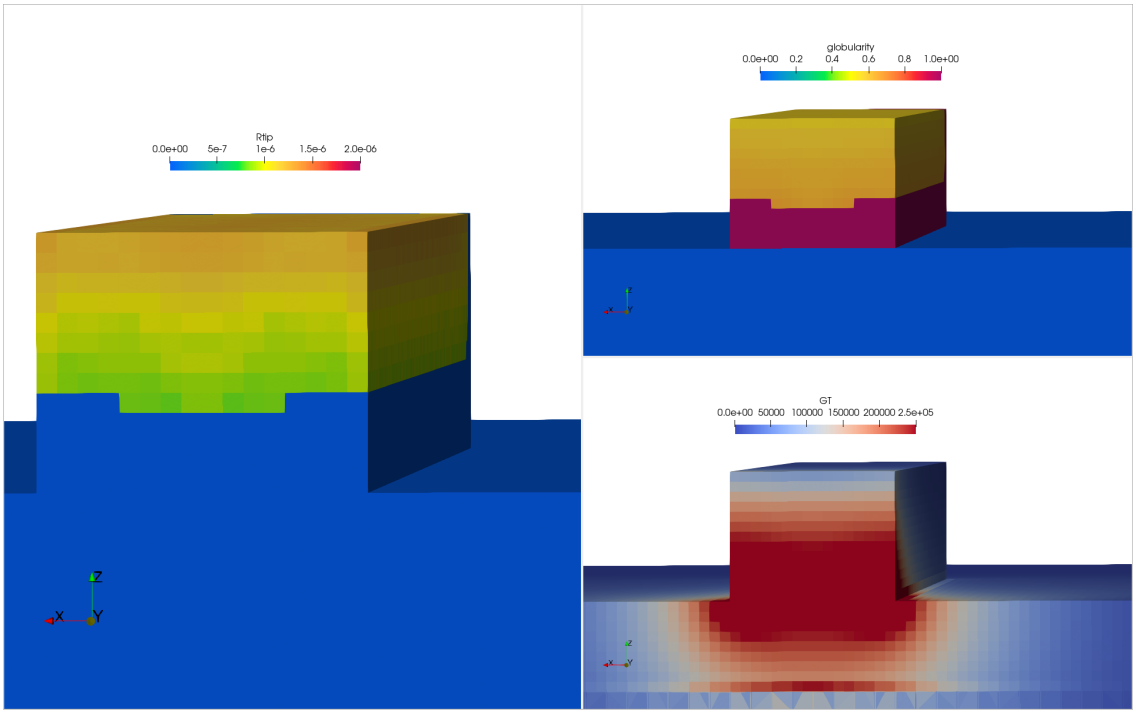


Figura 3.13: Distribución de R_{tip}, g_i y GT, para un bajo HI para un tiempo de 8 [s]

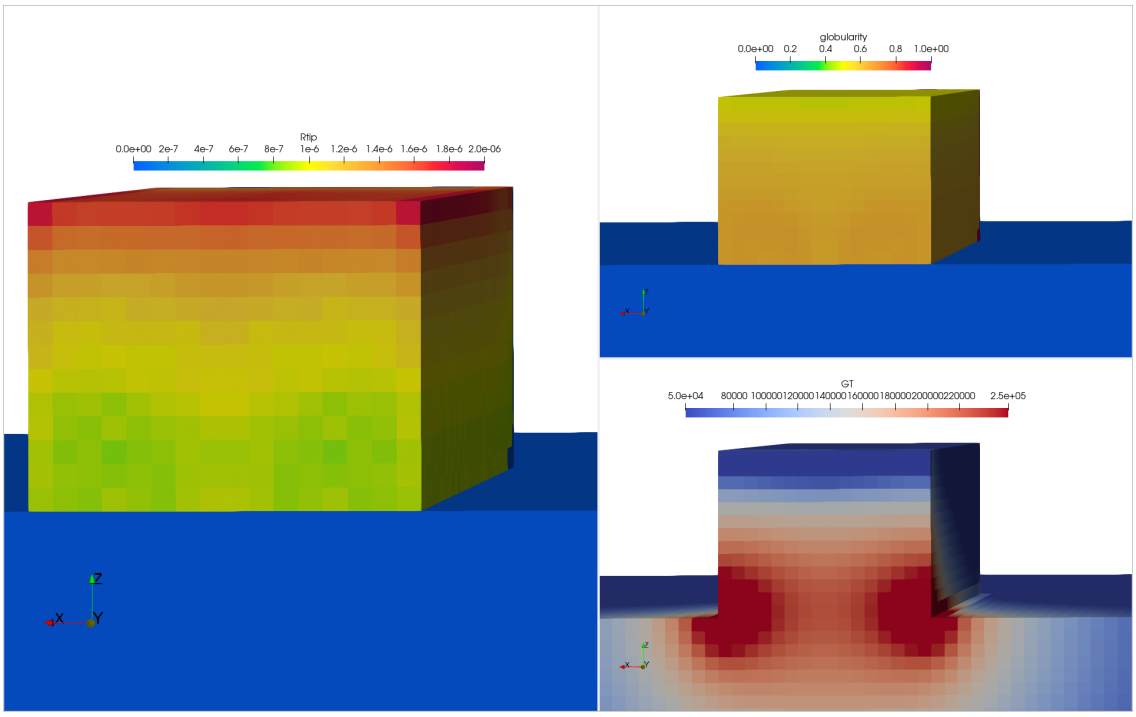


Figura 3.14: Distribución de R_{tip}, g_i y GT, para un alto HI para un tiempo de 8 [s]

3.5. Alcances y limitaciones del modelo

La principal limitación del modelo corresponde al modelo de energía puntual simulado. Este modelo no considera la distribución de las energías utilizadas en calentar y fundir el sustrato. Este calor no puede ser despreciable ya que según se reporta en la bibliografía, esta energía corresponde a más de la mitad de la energía aportada. Haelsig et al. [34] indican que esta energía va entre un 57 y un 70 % del total, por lo que no es una cantidad despreciable.

Para esto se propuso implementar un modelo modificado de Goldak, donde el 34 % del calor se aplica como energía puntual y el 66 % como energía distribuida según la fuente de Goldak. Sin embargo, la aplicación de este modelo no arrojó resultados comparables, por 2 causas, la mala estimación de los parámetros geométricos y el mal acoplamiento de Goldak al modelo de deposición de masa puntual. En este sentido, como la deposición de masa es puntual, Goldak no logra resolver bien su integral de energía, ya que la sección frente a la torcha no contiene material depositado por lo que las celdas no reciben la energía que debiesen.

Por lo anterior,la parte frontal de la fuente de Goldak es solo efectiva para el sustrato que se encuentra frente a la torcha, pero no para las celdas vacías del cordón. La determinación de parámetros geométricos mediante calibración experimental y la aplicación de un modelo de masa distribuido no eran parte del límite de batería del trabajo pero son recomendaciones para trabajos futuros.

Otra limitación es que el modelo no aplica remelting, ya que si bien el sustrato durante la deposición

alcanza temperaturas mayores a la temperatura de fusión, la simulación nunca reporta una variación en las fracciones de fases, ni valores de radio de punta o velocidad punta. Por lo anterior, esta zona no despreciable queda fuera del acoplamiento al modelo microestructural.

Otra limitación importante es que el modelo no considera convección en el líquido, por lo que los balances que ocurren a causa de la convección y que modifican resultados de microestructura, como el balance de momentum y aplicación de ecuaciones de Navier Stokes no se aplican a la simulación.

Pese a todas las limitaciones mencionadas, las simulaciones arrojan tendencias esperables físicamente. Por lo que, se demuestra que la aplicación de estos modelos es viable para aplicaciones asociadas a la fabricación de un cordón de soldadura y posteriormente a la manufactura aditiva. Además, esto se logra, sin la necesidad de realizar una simulación a microescala que conlleva costos computacionales mayores que la macroescala aplicada.

Por lo anterior, la formulación de este modelo es de gran importancia, ya que marca un inicio en el acoplamiento de modelos, para obtener parámetros microestructurales en manufactura aditiva. Ya que la mayoría de softwares de licencia pagada, no entregan información microestructural. Por esto, el acoplamiento de modelos realizado, aunque posee una gran cantidad de limitaciones, representa una oportunidad de desarrollo. Debido a que, mediante la aplicación de mejoras y la posterior calibración y validación experimental, se espera lograr que en el largo plazo, el modelo pueda ser utilizado en la planificación de procesos de fabricación de geometrías complejas, permitiendo determinar patrones de deposición, tiempo entre pasadas, entre otros parámetros, sin necesidad de obtener estas ventanas de trabajo de manera experimental.

Capítulo 4

Conclusiones

El modelo numérico acoplado, representa de manera coherente la transferencia de calor, la nucleación, la redistribución de soluto y el crecimiento dendrítico, durante la solidificación de la primera capa de un cordón fabricado mediante WAAM. Permitiendo calcular la evolución temporal y la distribución espacial de parámetros térmicos y microestructurales, entre ellos la temperatura, la fracción sólida, la fracción de envolvente, la concentración de soluto, la velocidad de punta dendrítica, el radio de punta y la globularidad. Esto representa un avance respecto de los modelos exclusivamente térmicos, ya que permite relacionar las condiciones operacionales del proceso con la cinética de solidificación.

La evolución de la fracción de sólido permitió identificar las distintas etapas que ocurren durante la solidificación. Diferenciando una primera etapa dominada por la nucleación, una segunda etapa de crecimiento acelerado de la envolvente y una etapa final carzada por el engrosamiento de las regiones sólidas. La disminución progresiva de la velocidad de crecimiento se relacionó con la reducción del líquido extradendrítico disponible y con el enriquecimiento de este en soluto.

Además, el modelo reprodujo la relación inversa entre el radio de punta dendritica y la velocidad de punta, indicando que las velocidades de crecimiento aumentan con puntas más finas y de mayor curvatura.

Finalmente el modelo muestra la distribución espacial del gradiente térmico, el radio de punta y la globularidad demostrando diferencias a lo largo de la altura del cordón. Las regiones cercanas al sustrato presentaron mayores gradientes térmicos, menores radios de punta y una morfología más compacta. En cambio, hacia el interior del cordón se desarrollaron condiciones más favorables para un crecimiento ramificado o dendrítico, esto muestra nuevamente un respaldo físico con las tendencias reales. El aumento del aporte térmico favoreció la formación de puntas dendríticas de mayor radio. El radio máximo aumentó desde aproximadamente $0,7$ μm para el bajo aporte térmico hasta $1,2$ μm para el alto aporte térmico, esto comprueba que la física de los modelos se encuentra funcionando, ya que para mayores aportes termicos hay menores tasas de enfriamiento y por lo

tanto se obtienen microestructuras más gruesas.

Además este aumento del calor de aporte generó mayores temperaturas máximas, menores velocidades de enfriamiento y desplazó el inicio y término de la solidificación a tiempos mayores. Asimismo, produjo una zona afectada térmicamente más extensa, lo que indica que una mayor región del sustrato queda expuesta a temperaturas capaces de generar modificaciones microestructurales que pueden afectar negativamente las propiedades del cordón.

Sin embargo, para ambos casos las temperaturas máximas obtenidas se encuentran considerablemente sobreestimadas, debido al uso del modelo de fuente puntual que concentra toda la energía aportada en las celdas del cordón y no representa la distribución de energía real en el arco, omitiendo la energía utilizada en calentar y fundir el sustrato que representa más de la mitad del total de la energía aportada. Por esta razón, los resultados térmicos del modelo deben utilizarse para comparar tendencias y no como predicciones cuantitativas definitivas. Para mejorar su capacidad predictiva se requiere incorporar una fuente de calor distribuida correctamente calibrada, considerar la convección del baño fundido, implementar un modelo de transición columnar-equiaxial y realizar una validación experimental de los campos térmicos y microestructurales.

Con las comparaciones y tendencias estudiadas, se demuestra que a pesar de sus limitaciones, el modelo presentó tendencias consistentes con el comportamiento físico esperado y demostró que es posible acoplar modelos térmicos y microestructurales sin recurrir a una simulación completa a microescala. Por esto, este acoplamiento aplicado a manufactura aditiva representa una oportunidad de desarrollo, para que mediante la aplicación de mejoras y calibraciones, el modelo pueda ser utilizado en la planificación de procesos de fabricación de geometrías complejas, permitiendo determinar patrones de deposición, tiempo entre pasadas, entre otros parámetros, sin necesidad de obtener estas ventanas de trabajo de manera experimental.

Referencias

[1] D. Vanerio, M. Guagliano, and S. Bagherifard, "Emerging trends in large format additive manufacturing processes and hybrid techniques," Progress in Additive Manufacturing 2024 10:4, vol. 10, pp. 1945–1972, 9 2024.

[2] P. C. Priarone, E. Pagone, F. Martina, A. R. Catalano, and L. Settineri, "Multi-criteria environmental and economic impact assessment of wire arc additive manufacturing," CIRP Annals, vol. 69, pp. 37–40, 1 2020.

[3] K. Derekar, "Aspects of wire arc additive manufacturing (waam) of alumnium alloy 5183," tech. rep., Coventry University, 3 2020.

[4] N. A. Rosli, M. R. Alkahari, M. F. bin Abdollah, S. Maidin, F. R. Ramli, and S. G. Herawan, "Review on effect of heat input for wire arc additive manufacturing process," Journal of Materials Research and Technology, vol. 11, pp. 2127–2145, 3 2021.

[5] T. A. Rodrigues, V. Duarte, R. M. Miranda, T. G. Santos, and J. P. Oliveira, "Current status and perspectives on wire and arc additive manufacturing (waam)," Materials, vol. 12, no. 7, 2019.

[6] S. W. Williams, F. Martina, A. C. Addison, J. Ding, G. Pardal, and P. Colegrove, "Wire + arc additive manufacturing," Materials Science and Technology, vol. 32, pp. 641–647, 6 2016.

[7] S. R. Singh and P. Khanna, "Wire arc additive manufacturing (waam): A new process to shape engineering materials," Materials Today: Proceedings, vol. 44, pp. 118–128, 1 2021.

[8] J. Singh, V. Il'yenko, and J. P. Oliveira, "Comparative study of gtaw and gmaw for waam: Microstructural and mechanical insights in er70s-6 and 316l stainless steel depositions," Science and Technology of Welding and Joining, 5 2025.

[9] L. P. Raut and R. V. Taiwade, "Wire arc additive manufacturing: A comprehensive review and research directions," Journal of Materials Engineering and Performance, vol. 30, pp. 4768–4791, 7 2021.

[10] K. Kanishka and B. Acherjee, "Process parameter effects and predictive control of bead geometry in single- and multi-layer wire arc additive manufacturing of structural steel with mechanical evaluation," Journal of Materials Engineering and Performance 2026, pp. 1–18, 3 2026.

[11] S. Kou, "Welding metallurgy, second edition," Welding Metallurgy, Second Edition, pp. 1–461, 1 2003.

[12] M. Moda, A. Chiocca, G. Macoretta, B. D. Monelli, and L. Bertini, "Technological implications of the rosenthal solution for a moving point heat source in steady state on a semi-infinite solid," Materials & Design, vol. 223, p. 110991, 11 2022.

[13] N. Pradeep, P. Sadasivam, Gurunathan, S. Kumar, M. Amirthalingam, P. Sadasivam, and G. S. Kumar, "Data-driven modelling of complex current–voltage waveform controlled gas metal arc-wire ded processes," Metals and Materials International 2022 29:4, vol. 29, pp. 1113–1131, 9 2022.

[14] M. M. Yazdi and D. K. Aidun, "A modified goldak heat source for enhanced wire arc additive manufacturing modeling," Welding Journal, vol. 105, pp. 95s–117s, 4 2026.

[15] A. Chergui, F. Villeneuve, N. Béraud, and F. Vignat, "Thermal simulation of wire arc additive manufacturing: a new material deposition and heat input modelling," International Journal on Interactive Design and Manufacturing, vol. 16, pp. 227–237, 3 2022.

[16] D. A. Porter, K. E. Easterling, and M. Y. Sherif, "Phase transformations in metals and alloys, fourth edition," Phase Transformations in Metals and Alloys, Fourth Edition, pp. 1–556, 1 2021.

[17] E. Rodríguez and B. México, "EvaluaciÓn modelado matemÁtico factores favorecen unidireccionalidad solidificaciÓn aleaciÓn al-cu4.5 %"," 2013.

[18] D. M. Stefanescu and R. Ruxanda, "Fundamentals of solidification," Metallography and Microstructures, pp. 71–92, 12 2018.

[19] A. F. Ferreira, K. G. Paradela, P. Felipe, Z. Alcântara, and A. Garcia, "Phase-field simulation of microsegregation and dendritic growth during solidification of hypoeutectic al-cu alloys," Materials Research, vol. 20, pp. 423–429, 3 2017.

[20] M. A. Steiner, E. Garlea, and S. R. Agnew, "Modeling solute segregation during the solidification of γ-phase u-mo alloys," Journal of Nuclear Materials, vol. 474, pp. 105–112, 6 2016.

[21] M. Rappaz and J. Dantzig, Solidification. Engineering sciences, EFPL Press, 2009.

[22] L. Heyvaert, M. Bedel, M. Založnik, and H. Combeau, "Modeling of the coupling of microstructure and macrosegregation in a direct chill cast al-cu billet," Metallurgical and Materials Transactions A: Physical Metallurgy and Materials Science, vol. 48, pp. 4713–4734, 10 2017.

[23] A. Hozoorbakhsh, M. Hamdi, A. A. D. M. Sarhan, M. I. S. Ismail, C. Y. Tang, and G. C. P. Tsui, "Cfd modelling of weld pool formation and solidification in a laser micro-welding process," International Communications in Heat and Mass Transfer, vol. 101, pp. 58–69, 2 2019.

[24] L. Heyvaert, M. Bedel, M. Založnik, and H. Combeau, "Modeling of the coupling of microstructure and macrosegregation in a direct chill cast al-cu billet," Metallurgical and Materials Transactions A: Physical Metallurgy and Materials Science, vol. 48, pp. 4713–4734, 10 2017.

[25] , , , , and , "Evaluación del radio de curvatura de la punta de la dendrita en aleaciones a base de sn mediante observación directa," , vol. 82, no. 3, pp. 78–83, 2018.

[26] H. Neumann-Heyme, N. Shevchenko, J. Grenzer, K. Eckert, C. Beckermann, and S. Eckert, "$in-situ$ measurements of dendrite tip shape selection in a metallic alloy," Phys. Rev. Mater., vol. 6, p. 063401, Jun 2022.

[27] Z. Chen, L. Yuan, Z. Pan, H. Zhu, N. Ma, D. Ding, and H. Li, "A comprehensive review and future perspectives of simulation approaches in wire arc additive manufacturing (waam)," International Journal of Extreme Manufacturing, vol. 7, p. 022016, 1 2025.

[28] R. F. Sampaio, J. P. Pragana, I. M. Bragança, C. M. Silva, C. V. Nielsen, and P. A. Martins, "Modelling of wire-arc additive manufacturing – a review," Advances in Industrial and Manufacturing Engineering, vol. 6, p. 100121, 5 2023.

[29] S. Mazumder, "Comparative assessment of the finite difference, finite element, and finite volume methods for a benchmark one-dimensional steady-state heat conduction problem," Journal of Heat Transfer, vol. 139, 7 2017.

[30] H. Jasak, "Openfoam: Open source cfd in research and industry," International Journal of Naval Architecture and Ocean Engineering, vol. 1, pp. 89–94, 12 2009.

[31] M. B. Hermosilla, P. Javier, G. Montero, and R. C. Lopez, "Study of heat and mass transfer applications in the field of engineering by using openfoam," tech. rep.

[32] J. Szyndler, M. Apel, and S. Härtel, "Prediction of the microstructure morphology after the waam process based on the fem simulation results," Materials Research Proceedings, vol. 41, pp. 22–31, 2024.

[33] A. Chergui, F. Villeneuve, N. Béraud, and F. Vignat, "Thermal simulation of wire arc additive manufacturing: a new material deposition and heat input modelling," International Journal on Interactive Design and Manufacturing, vol. 16, pp. 227–237, 3 2022.

[34] A. Haelsig, M. Kusch, and P. Mayr, "Calorimetric analyses of the comprehensive heat flow for gas metal arc welding," Welding in the World 2014 59:2, vol. 59, pp. 191–199, 9 2014.

[35] N. Ahmad, J. Rappaz, J.-L. Desbiolles, T. Jalanti, M. Rappaz, H. Combeau, G. Lesoult, and C. Stomp, "Numerical simulation of macrosegregation: a comparison between finite volume method and finite element method predictions and a confrontation with experiments," Metallurgical and Materials Transactions A, vol. 29, no. 2, pp. 617–630, 1998.

[36] M. M. C. Fernandez, "Modeling of solidification of tial alloys in centrifugal casting," 12 2019.

[37] K. O. Tveito, A. Pakanati, M. M'Hamdi, H. Combeau, and M. Založnik, "A simplified three-phase model of equiaxed solidification for the prediction of microstructure and macrosegregation in castings," Metallurgical and Materials Transactions A 2018 49:7, vol. 49, pp. 2778–2794, 4 2018.

[38] V. T. Le, D. S. Mai, T. K. Doan, and H. Paris, "Wire and arc additive manufacturing of 308l stainless steel components: Optimization of processing parameters and material properties," Engineering Science and Technology, an International Journal, vol. 24, pp. 1015–1026, 8 2021.

[39] M. Bedel, Étude de la formation des structures de solidification et des macroségrégations en coulée semi-continue d'aluminium. PhD thesis, 2014. Thèse de doctorat dirigée par Combeau, Hervé et Založnik, Miha Sciences des matériaux Université de Lorraine 2014.

[40] G. Turichin, M. Kuznetsov, A. Pozdnyakov, S. Gook, A. Gumenyuk, and M. Rethmeier, "Influence of heat input and preheating on the cooling rate, microstructure and mechanical properties at the hybrid laser-arc welding of api 5l x80 steel," Procedia CIRP, vol. 74, pp. 748–751, 2018. 10th CIRP Conference on Photonic Technologies [LANE 2018].

[41] X. Liang, G. Agarwal, M. Hermans, C. Bos, and I. Richardson, "A multi-scale modeling framework for solidification cracking during welding," Acta Materialia, vol. 283, p. 120530, 2025.

[42] W. Zhang, G. Roy, J. Elmer, and T. DebRoya, "Modeling of heat transfer and fluid flow during gas tungsten arc spot welding of low carbon steel," JOURNAL OF APPLIED PHYSICS, vol. 93, no. 5, 2003.

Anexo A

Nomenclatura

Símbolo	Definición	Unidad
Proceso WAAM, geometría y deposición		
HI	Aporte térmico por unidad de longitud.	J/m
η	Eficiencia térmica del proceso.	[–]
V	Voltaje del arco.	V
I	Corriente eléctrica.	A
v_{avance}	Velocidad de avance de la antorcha.	m/s
WFS	Velocidad de alimentación del alambre.	m/s
A_{alambre}	Área transversal del alambre.	m^2
V_{celda}	Volumen de una celda del dominio.	m^3
n_c	Número de celdas activadas durante la deposición.	[–]
$P(t)$	Posición de la antorcha en el instante t.	m
P_0	Posición inicial de la antorcha.	m
r	Radio del alambre.	m
α_f	Fracción volumétrica de llenado de una celda.	[–]
S_α	Tasa de llenado volumétrico de una celda.	1/s
$\dot{m}$	Flujo másico del material de aporte.	kg/s
Modelo térmico y fuentes de calor		
t	Tiempo físico.	s
Δt	Paso de tiempo.	s
T	Temperatura local.	K
T_0	Temperatura inicial o ambiente.	K
T_f	Temperatura de fusión del componente puro.	K
T_m	Temperatura de fusión o liquidus utilizada en el balance de energía.	K

Símbolo	Definición	Unidad
T_L	Temperatura liquidus de la aleación.	K
T_S	Temperatura solidus de la aleación.	K
T_{dep}	Temperatura de deposición del material.	K
ρ	Densidad del material.	kg/m^3
c_p	Calor específico.	J/(kg K)
k_T	Conductividad térmica.	W/(m K)
α_T	Difusividad térmica.	$\text{m}^2\text{/s}$
h	Entalpía específica.	J/kg
h_l	Entalpía específica de la fase líquida.	J/kg
h_s	Entalpía específica de la fase sólida.	J/kg
L_f	Calor latente de fusión.	J/kg
S_h	Término fuente volumétrico de energía.	W/m^3
Q	Potencia efectiva de la fuente de calor.	W
Q_{arc}	Potencia del arco utilizada en el modelo de Goldak.	W
q_f	Densidad volumétrica de potencia en el semielipsoide frontal de Goldak.	W/m^3
q_r	Densidad volumétrica de potencia en el semielipsoide posterior de Goldak.	W/m^3
f_f, f_r	Fracciones de distribución de energía frontal y posterior.	[−]
a_f, a_r	Semilongitudes frontal y posterior de la fuente de Goldak.	m
b, c	Semiancho y profundidad de la fuente de Goldak.	m
Z_0	Desplazamiento de la fuente de Goldak respecto del origen.	m
R_{Ros}	Distancia radial desde la fuente puntual en la solución de Rosenthal.	m
G	Gradiente térmico.	K/m
R_{sol}	Velocidad macroscópica del frente de solidificación.	m/s
$\dot{T}$	Tasa local de calentamiento o enfriamiento.	K/s
Fracciones de fase, soluto y nucleación		
g_k	Fracción volumétrica de una fase genérica k.	[−]
g_s	Fracción volumétrica de sólido.	[−]
g_l	Fracción volumétrica total de líquido.	[−]
g_e	Fracción volumétrica de envolvente dendrítica.	[−]
g_{li}	Fracción volumétrica de líquido intradendrítico.	[−]
g_{le}	Fracción volumétrica de líquido extradendrítico.	[−]
g_i	Fracción sólida interna de la envolvente, $g_i = g_s/g_e$.	[−]
dg_s/dt	Tasa temporal de formación de sólido.	1/s
ρ_s, ρ_l	Densidad de las fases sólida y líquida.	kg/m^3
Γ_k	Tasa másica de crecimiento de una fase genérica.	$\text{kg/(m}^3\,\text{s)}$
Γ_s	Tasa másica de crecimiento de la fase sólida.	$\text{kg/(m}^3\,\text{s)}$

Símbolo	Definición	Unidad
Γ_e	Tasa volumétrica de crecimiento de la envolvente.	$1/\mathrm{s}$
Φ_k	Tasa másica de producción de una fase por nucleación.	$\mathrm{kg}/(\mathrm{m}^3\,\mathrm{s})$
Φ_s	Tasa másica de producción de sólido por nucleación.	$\mathrm{kg}/(\mathrm{m}^3\,\mathrm{s})$
C_0	Concentración inicial o nominal de soluto.	[–]
C_l, C_s	Concentración de soluto en las fases líquida y sólida.	[–]
$\langle C_l \rangle^{l,i}$	Concentración promedio del soluto i en la fase líquida.	[–]
$\langle C_s \rangle^{s,i}$	Concentración promedio del soluto i en la fase sólida.	[–]
$\langle C_l \rangle^{le,i}$	Concentración promedio del soluto i en el líquido extradendrítico.	[–]
$C_l^{*,i}$	Concentración de equilibrio del soluto i en el lado líquido de la interfase.	[–]
$C_s^{*,i}$	Concentración de equilibrio del soluto i en el lado sólido de la interfase.	[–]
k_p^i	Coeficiente de partición del soluto i.	[–]
m_l^i	Pendiente de la línea liquidus para el soluto i.	K
D_l^i, D_s^i	Coeficientes de difusión del soluto i en líquido y sólido.	m^2/s
δ_l, δ_s	Longitudes características de difusión en líquido y sólido.	m
S_v^e	Área superficial específica de la envolvente.	$1/\mathrm{m}$
S_v^s	Área interfacial específica del sólido.	$1/\mathrm{m}$
N^j	Densidad volumétrica de núcleos disponibles de la clase j.	$1/\mathrm{m}^3$
$\dot{N}^j$	Tasa de activación de núcleos de la clase j.	$1/(\mathrm{m}^3\,\mathrm{s})$
N_g	Densidad volumétrica de granos.	$1/\mathrm{m}^3$
V_0	Volumen inicial de un grano recién nucleado.	m^3
ΔT	Subenfriamiento local.	K
ΔT_n^j	Subenfriamiento crítico de nucleación de la clase j.	K
λ_2	Espaciamiento secundario entre brazos dendríticos.	m
m_g	Exponente geométrico utilizado en el cálculo de S_v^s.	[–]
Crecimiento dendrítico y longitudes de difusión		
R	Longitud característica de la envolvente octaédrica.	m
R_{env}	Radio esférico equivalente de la envolvente.	m
R_f	Radio máximo asociado al volumen disponible para cada grano.	m
R_{tip}	Radio de la punta dendrítica.	m
V_{tip}	Velocidad de avance de la punta dendrítica.	m/s
V_g	Velocidad equivalente de crecimiento de la envolvente esférica.	m/s
Γ_{GT}	Coeficiente de Gibbs–Thomson.	K m
σ^*	Constante de selección dendrítica.	[–]
Ω_T	Sobresaturación térmica.	[–]
Ω_C	Sobresaturación solutal.	[–]
$F(Pe, Pu, Re)$	Función utilizada para calcular las sobresaturaciones térmica y solutal.	[–]

Símbolo	Definición	Unidad
Pe_T, Pe_C	Números de Péclet térmico y solutal asociados al crecimiento.	[−]
Pu_T, Pu_C	Números de Péclet térmico y solutal asociados a la convección.	[−]
Pr	Número de Prandtl.	[−]
Sc	Número de Schmidt.	[−]
Re_T, Re_C	Números de Reynolds modificados para los campos térmico y solutal.	[−]
μ_l	Viscosidad dinámica del líquido.	Pa s
ν_l	Viscosidad cinemática del líquido.	m^2/s
d	Distancia característica de difusión, $d = D_l/V_g$.	m
Índices de resolución numérica		
n	Índice del paso de tiempo convergido.	[−]
p	Índice de la iteración interna dentro de un mismo paso de tiempo.	[−]
tr	Superíndice que identifica el estado posterior al transporte.	[−]
nucl	Superíndice que identifica el estado posterior a la nucleación.	[−]
$*$	Superíndice que identifica una magnitud de equilibrio en la interfase.	[−]

Anexo B

Formulación de la malla

En este anexo se presenta el archivo `snappyHexMeshDict` utilizado para ajustar y refinar la malla de fondo a partir de las superficies del sustrato y del cordón definidas en formato STL. En la configuración empleada se activó únicamente la etapa de *castellation*, mientras que las etapas de *snapping* y *layer addition* permanecieron desactivadas.

B.1. Archivo `snappyHexMeshDict`

El archivo define las superficies geométricas, los niveles de refinamiento y los parámetros de calidad utilizados durante la generación de la malla volumétrica. Las superficies correspondientes al cordón fueron refinadas con un nivel mayor que las superficies del sustrato, con el propósito de aumentar la resolución espacial en la región donde se aplicaron los modelos de deposición de masa, deposición de energía y predicción microestructural.

Listing B.1: Archivo `snappyHexMeshDict` utilizado para la generación y el refinamiento de la malla.

```
FoamFile
{
    format      ascii;
    class       dictionary;
    object      snappyHexMeshDict;
}

castellatedMesh true;
snap            false;
addLayers       false;

geometry
{

    top-cordon.stl
```

```
    {
        type triSurfaceMesh;
        name top-cordon;
    }
    top.stl
    {
        type triSurfaceMesh;
        name top;
    }
    start-end-cordon.stl
    {
        type triSurfaceMesh;
        name start-end-cordon;
    }

    sides.stl
    {
        type triSurfaceMesh;
        name sides;
    }

    bottom.stl
    {
        type triSurfaceMesh;
        name bottom;
    }
    side-cordon.stl
    {
        type triSurfaceMesh;
        name side-cordon;
    }

};

castellatedMeshControls
{

    maxLocalCells 100000;

    maxGlobalCells 7000000;

    minRefinementCells 10000;

    nCellsBetweenLevels 1;

    features
    (
        {
            file "top-cordon.eMesh";
```

```
65              level 1;
66          }
67          {
68              file "top.eMesh";
69              level 1;
70          }
71          {
72              file "start-end-cordon.eMesh";
73              level 1;
74          }
75          {
76              file "side-cordon.eMesh";
77              level 1;
78          }
79          {
80              file "sides.eMesh";
81              level 1;
82          }
83          {
84              file "bottom.eMesh";
85              level 1;
86          }
87
88      );
89
90      refinementSurfaces
91      {
92
93          bottom
94          {
95
96              level (1 1);
97
98          }
99          top-cordon
100         {
101
102             level (2 2);
103
104         }
105         start-end-cordon
106         {
107
108             level (2 2);
109
110         }
111         sides
112         {
113
```

```
            level (1 1);

        }
        side-cordon
        {

            level (2 2);

        }
        top
        {

            level (1 1);

        }
    }

    resolveFeatureAngle 30;

    refinementRegions
    {

    }

    locationInMesh (1 1 -14);

    allowFreeStandingZoneFaces true;
}

snapControls
{

    nSmoothPatch 3;

    tolerance 1.0;

    nSolveIter 100;

    nRelaxIter 5;

        nFeatureSnapIter 10;

        implicitFeatureSnap false;

        explicitFeatureSnap true;

        multiRegionFeatureSnap false;
}

```

```
addLayersControls
{

    relativeSizes true;

    layers
    {
        "mesh_.*"
       {
            nSurfaceLayers 0;
       }
    }

    expansionRatio 1.1;

    finalLayerThickness 0.3;

    minThickness 0.25;

    nGrow 0;

    featureAngle 30;

    nRelaxIter 5;

    nSmoothSurfaceNormals 1;

    nSmoothNormals 3;

    nSmoothThickness 10;

    maxFaceThicknessRatio 0.5;

    maxThicknessToMedialRatio 0.3;

    minMedianAxisAngle 90;

    nBufferCellsNoExtrude 0;

    nLayerIter 50;

    nRelaxedIter 20;
}

meshQualityControls
{
    #include "./system/meshQualityDict"

    relaxed
```

```
212     {
213
214         maxNonOrtho 65;
215     }
216
217     nSmoothScale 4;
218
219     errorReduction 0.75;
220 }
221
222 writeFlags
223 (
224     scalarLevels
225     layerSets
226     layerFields
227 );
228
229 mergeTolerance 1e-6;
```

Anexo C

Cálculo de las longitudes de difusión

Las longitudes características de difusión se calcularon mediante el modelo propuesto por Cisternas et al. [36] Debido a que la formulación original considera envolventes esféricas, para su aplicación a envolventes octaédricas se utilizó un radio esférico equivalente, obtenido a partir de la fracción de envolvente y la densidad volumétrica de granos.

Dimensiones características de la envolvente La longitud característica de la envolvente octaédrica se calculó como:

$$R = \sqrt[3]{\frac{3g_e}{4N_g}} \tag{C.1}$$

donde g_e corresponde a la fracción volumétrica de envolvente y N_g a la densidad volumétrica de granos.

A partir de la equivalencia de volumen entre una envolvente octaédrica y una envolvente esférica, se calculó el radio equivalente:

$$R_{\text{env}} = \sqrt[3]{\frac{3g_e}{4\pi N_g}} \tag{C.2}$$

El radio máximo asociado al volumen disponible para cada grano se determinó mediante:

$$R_f = \sqrt[3]{\frac{3}{\pi N_g}} \tag{C.3}$$

Velocidad equivalente de crecimiento Debido al cambio desde una geometría octaédrica a una representación esférica equivalente, la velocidad de crecimiento de la envolvente se calculó como:

$$V_g = \frac{1}{\pi}\left(\frac{R}{R_{\text{env}}}\right)^2 V_{\text{tip}} \tag{C.4}$$

donde V_{tip} corresponde a la velocidad de avance de la punta dendrítica y V_g a la velocidad equivalente de crecimiento de la envolvente esférica.

Distancia característica de difusión La distancia característica asociada al transporte difusivo del soluto se calculó mediante:

$$d = \frac{D_l^i}{V_g} \tag{C.5}$$

donde D_l^i corresponde al coeficiente de difusión del soluto i en la fase líquida.

Debido a que el modelo implementado no considera convección ni movimiento relativo entre las fases, la distancia disponible entre la envolvente y el límite de influencia del grano se definió como:

$$\Delta = R_f - R_{\text{env}} \tag{C.6}$$

Funciones geométricas auxiliares Para el cálculo de la longitud de difusión en el líquido se utilizaron las siguientes funciones geométricas:

$$f\left(R_{\text{env}}, \Delta\right) = \frac{\left(R_{\text{env}} + \Delta\right)^2 - R_{\text{env}}^2}{2} \tag{C.7}$$

$$g\left(R_f, R_{\text{env}}, \Delta\right) = \frac{R_f^3 - \left(R_{\text{env}} + \Delta\right)^3}{3\left(R_{\text{env}} + \Delta\right)} \tag{C.8}$$

Longitud de difusión en el líquido Finalmente, la longitud característica de difusión en la fase líquida se calculó mediante:

$$\delta_l = d\left\{\frac{d}{R_{\text{env}}} - \frac{f\left(R_{\text{env}}, \Delta\right) + g\left(R_f, R_{\text{env}}, \Delta\right)}{d\left[R_{\text{env}} + d - \left(R_{\text{env}} + \Delta + d\right)\exp\left(-\frac{\Delta}{d}\right)\right] - f\left(R_{\text{env}}, \Delta\right) + \left[\exp\left(-\frac{\Delta}{d}\right) - 1\right] g\left(R_f, R_{\text{env}}, \Delta\right)}\right\}^{-1}. \tag{C.9}$$

Longitud de difusión en el sólido La longitud característica de difusión en la fase sólida se aproximó como:

$$\delta_s = \frac{R_{\rm env}}{5} \tag{C.10}$$