

FEM modelling of heat transfer in ceramic material synthesis process under electric arc

**Juan A. Pozo-Morejón^{1*}, Jorge L. García-Jacomino¹, Gema González²,
R. Quintana-Puchol¹**

¹*Centro de Investigaciones de Soldadura (CIS), Facultad de Ingeniería Mecánica, Universidad Central "Marta Abreu" de Las Villas. Carretera a Camajuaní Km. 5½, Santa Clara, Villa Clara, Cuba, CP. 54830. *jpozo@uclv.edu.cu*

²*Centro de Ingeniería de Materiales y Nanotecnología, Instituto Venezolano de Investigaciones Científicas (IVIC). Apdo. 21827. Caracas 1020A, Venezuela*

Abstract

In this paper, a general characterization of ceramic materials and SiC-Al₂O₃-specific obtained by Self-sustained Synthesis of High Temperature Assisted by Electric Arc (EA-SHS) process developed by researchers at CIS. It describes the physical and thermal characteristics of the materials involved in the reaction system, raw materials SiO₂-Al-C and furnace materials - to perform the finite element model (FEM) and simulated by ANSYS-MULTIPHYSICS software transfer heat produced by a power source to the pickup point of the reactants and other elements of the oven. It declares the heat transfer by convection and radiation from high temperature process. The MEF obtained model was run with various intensities of the heat source (100, 80, 60 and 40 A), observing the behaviour of the temperature vs. time at different points of the pellet and providing technical criteria for carrying out the synthesis of the ceramic material.

Keywords: MEF, EA-SHS, ceramic material, electric arc.

Modelación mediante MEF de la transferencia de calor en proceso de síntesis de material cerámico bajo arco eléctrico

Resumen

En el presente trabajo se realiza una caracterización general de los materiales cerámicos, y en específico del SiC-Al₂O₃ obtenido mediante la Síntesis Auto-sostenida de Alta Temperatura asistida por Arco Eléctrico (SHS-AE), proceso desarrollado por investigadores del CIS. Se describen las características físico-térmicas de los materiales involucrados en la reacción –materias primas del sistema SiO₂-Al-C y materiales del horno– para luego poder realizar el Modelo por Elementos Finitos (MEF) y simular mediante el software ANSYS-MULTIPHYSICS la transferencia de calor producida por una fuente de energía puntual hacia la pastilla de los reactantes y demás elementos del horno. Se declara la transferencia de calor por convección y radiación por la alta temperatura del proceso. El modelo MEF obtenido se ejecutó con varias intensidades de la fuente de calor (100, 80, 60 y 40 A), en el que se pudo observar el comportamiento de la temperatura respecto al tiempo en los diferentes puntos de la pastilla, y a su vez proporciono criterios tecnológicos para la realización de la síntesis del material cerámico.

Palabras clave: MEF, SHS-AE, material cerámico, arco eléctrico.

Introducción

En la última década la obtención por diferentes procesos del material cerámico SiC-Al₂O₃ ha sido reportada en varios trabajos científicos [1-7]. La utilización de la Síntesis por Combustión Auto-Sostenida de Alta Temperatura, conocida por SHS (Self-Propagating High-Temperature Synthesis), es un proceso [8] que consiste básicamente en comenzar la reacción a partir de una fuente de energía externa. Una vez iniciada la reacción, el calor exotérmico ayuda a que se propague a través de los reactantes, por todo el volumen y haga energéticamente auto-sostenido el proceso [9]. Debido a los grandes avances en la potencia de los equipos de cómputo, en los últimos 10 años, en el mundo ha alcanzado mucha fuerza el empleo de la modelación mediante el MEF [10], en particular mediante programas tales como ANSYS, ABAQUS, SYSWELD y WELDSIM, para modelar procesos, por ejemplo, en la soldadura, con vistas a resolver importantes problemas industriales. La modelación busca disminuir los costos de fabricación, los accidentes, los riesgos a la vida humana, los tiempos de trabajo, optimización de los procesos, entre otros. A lo anterior se suma que la modelación, como método predictivo, es menos costoso y brinda soluciones a corto plazo.

A pesar de que en la literatura se reportan aplicaciones en diversos campos, no se muestra el uso del MEF para establecer los criterios tecnológicos de la síntesis de un material cerámico. Partiendo de los trabajos precedentes de empleo del MEF en el CIS, para la modelación del proceso de soldeo, en este trabajo se pretende estudiar, mediante dicho método de simulación, el proceso de transferencia de calor en la síntesis por arco eléctrico (SHS-AE) de SiC-Al₂O₃ [11, 12], con vistas a definir los parámetros del régimen que aumentan el rendimiento y disminuyen los costos de obtención. En el trabajo se emplea el software ANSYS-MULTIPHYSICS versión 11.0.

Parte experimental

Características generales del horno y de la fuente de energía

El horno de arco eléctrico que se pretende modelar para la obtención del material cerámico,

es de arco triple, fabricación norteamericana, marca CENTORR Serie 5, alimentado por un rectificador ordinario de soldadura. El crisol cuenta con una base de grafito donde se apoya la pastilla, un cuerpo del mismo material que rodea dicha pastilla, una chaqueta de un material refractario (alúmina), para mantener el calor y proteger las piezas del exterior del calor extremo, y una base de cobre donde apoyan las demás piezas del horno, y que ayuda a disipar el calor ya que está en contacto con agua de un sistema de enfriamiento forzado (Figuras 1 y 2) [12].

Elaboración del modelo de elementos finitos que simula la transferencia de calor en el horno durante la síntesis SHS-AE

Construcción del modelo

Se construye el modelo de elementos finitos del horno, considerando las propiedades físicas de las materias primas involucradas en la reacción SHS-AE y de los materiales del horno de arco eléctrico (Tabla 1). Primeramente se definió un nombre al modelo, en este caso "horno".

Etapa de preprocesamiento (PREP 7)

1. Se dibujan las piezas en ANSYS.
2. Se selecciona el tipo de elemento finito a emplear, en este caso el "plane 77" (elemento cuadrilátero parabólico de 8 nodos, axisimétrico).
 - En las opciones del elemento se le declara que es axisimétrico (ya que el horno tiene simetría axial y está sometido a cargas térmicas también axisimétricas). El resultado que entrega el análisis 2D axisimétrico será más exacto que el análisis en el modelo en 3D [13].
 - Se selecciona el tipo de elemento para simular la radiación (*link 32*).
3. Se le declaran las propiedades físico-térmicas de los materiales (densidad, capacidad calorífica y conductividad térmica).
4. Se malla el modelo área por área, declarando las propiedades de cada material aplicables en cada caso. La malla se hace más fina en la zona cercana a la pastilla donde se introduce el flujo de calor del arco y el gra-

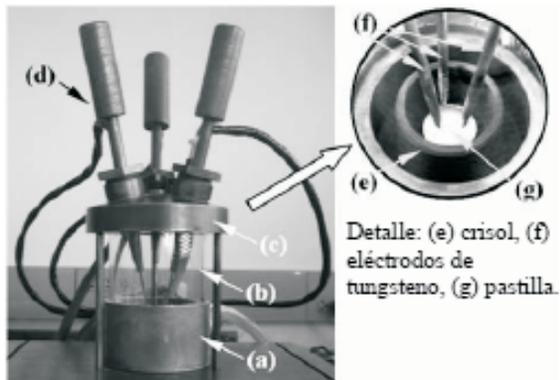


Figura 1. Reactor: (a) base ánodo [+], (b) cristal de observación, (c) tapa, (d) guías cátodo [-] .

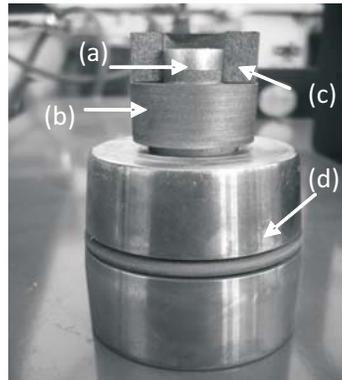


Figura 2. Crisol: (a) pastilla, (b) base de grafito, (c) cuerpo de grafito, (d) base de bronce.

Tabla 1
Propiedades termo-físicas de los materiales del horno

Propiedad	Alúmina	Cobre	Grafito	Pastilla
Densidad (kg/m ³)	3960	8930 a 20,0 °C	2250	2620
		7924 a 1100 °C		
		7846 a 1200 °C		
		7764 a 1300 °C		
Calor específico J/(kg·°C)	753 a 25,0 °C	385	707,68	819,65
	920 a 127 °C			
	1046 a 227 °C			
	1088 a 327 °C			
	1172 a 527 °C			
	1216 a 727 °C			
	1238 a 927 °C			
	1247 a 1127 °C			
1255 a 1327 °C				
Conductividad térmica W/m·K	6,30 a 800 °C	357 a 727 °C	24,0	141,53
	13,0 a 527 °C	398 a 27 °C		

diente térmico es mayor, con un tamaño de elemento de 0,6 mm y más basta en la base del horno con 2,0 mm.

- Se declara la transferencia de calor por convección en las superficies exteriores. En la Figura 3 se puede apreciar, señalado con flechas oscuras.
- Se declara el coeficiente de película por convección, que para las superficies que están en contacto con el argón es de 25 W/(m²·°C), ya que el gas se encuentra casi estático.

Se establece en la mitad inferior de la superficie exterior de la base de cobre, un coeficiente de película de 500 W/(m²·°C), ya que es una zona que está siendo enfriada por un flujo forzado de agua.

- Se crean los elementos superficiales (*link 32*), para modelar la radiación. En la Figura 4 se pueden apreciar las superficies donde se declara la radiación.
- Se crea un nodo adicional espacial (100000), fuera del modelo del horno, que

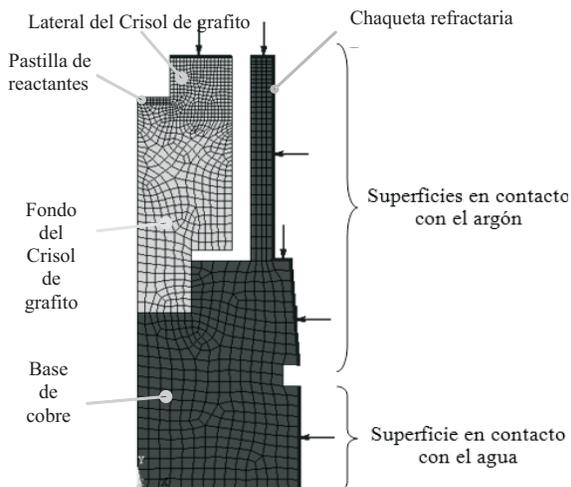


Figura 3. Modelo en 2D del horno. Las flechas señalan las paredes donde se declara la transferencia de calor.

simula la absorción de la radiación por parte del espacio circundante.

Fin de la etapa de preprocesamiento (PREP 7)

Etapla generador de método de matriz (AUX 12)

9. Se crea la matriz de radiación.
 - Se le declaran las emisividades a los materiales [14-16]
 - Grafito: 0,98 Cobre: 0,7
 - Alúmina: 0,6 Pastilla: 0,87
 - Se declara la constante de Stefan Boltzmann ($5,67E-8 \text{ W}/(\text{m}^2 \cdot ^\circ\text{C}^4)$), y el número de divisiones (NDIV). Se asumen 16 divisiones.
 - Se define al nodo espacial, el 100000.
 - Se declara el tipo de procedimiento, caso Hidden.
 - Se declara el número de zonas para el procedimiento Hidden, en este caso se declaran 20 zonas.
 - Se declara un nombre a la matriz de radiación y se guarda en la carpeta, Matriz.

Fin etapa generador de método de matriz (AUX 12)

Etapla de preprocesamiento (PREP 7)

10. Se declara el súper-elemento (MATRIX50).

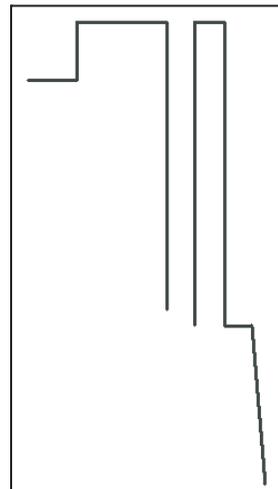


Figura 4. Modelo en 2D del horno, paredes donde se declara la transferencia de calor por radiación.

- Se declara la opción del súper-elemento (Térmica)

- Se define el súper-elemento a partir de leer la matriz escrita en la carpeta.

Fin de la etapa de preprocesamiento (PREP 7)

Etapla solución (SOL)

11. Se declara análisis transitorio.
 - Se establece el método de solución (FULL) para análisis transitorios.
12. Se selecciona el valor de convergencia de solución en $0,1 \text{ } ^\circ\text{C}$.
13. Se activa AUTOSTEP para la solución.
14. Se especifica aplicación de carga de rampa (ramped).
15. Se declara el tiempo de inicio de la corrida $1E-6 \text{ s}$.
16. Se declara la temperatura inicial del modelo ($30 \text{ } ^\circ\text{C}$).
17. Se fija la temperatura del nodo espacial que simula el medio circundante ($30 \text{ } ^\circ\text{C}$).
18. Mediante lazos *DO-* ENDDO se aplica el flujo de calor en pasos de tiempo de 0,5 s hasta completar los 120 s, tiempo de arco que se considera para la obtención del material cerámico y al que se llega luego de una corrida previa del modelo.

Según fórmula recomendada, se calcula que el paso de tiempo que debe ser mayor a $9,5 \cdot 10^{-4}$ s [13]. Para ejecutar la corrida, se toma 0,5 s (se corrió otro modelo con paso de tiempo de 2 s y los resultados fueron similares). No se toma un paso de tiempo mucho más pequeño para no aumentar excesivamente el tiempo de cálculo.

Se aplica el flujo de calor por la parte superior de la pastilla (1).

$$HFLUX_1 = \frac{Q_{ef}}{A_{pastilla}} \quad (1)$$

$$A_{pastilla} = \frac{\pi \cdot d^2}{4} \quad (2)$$

$$Q_{ef} = \eta \cdot I \cdot V_a \quad (3)$$

donde:

$HFLUX_1$: Flujo de calor que se le entra a la pastilla; (W/m²)

Q_{ef} : Potencia del arco eléctrico con electrodos de tungsteno en argón; (W)

$A_{pastilla}$: Área de la pastilla; (m²)

d : Diámetro de la pastilla; (m)

η : Eficiencia del arco eléctrico con electrodos de tungsteno en atmósfera de argón. (Esta eficiencia está en los valores de 0,5-0,6 para soldadura GTAW en espacio abierto, pero se toma 0,7 ya que el arco se encuentra en un espacio cerrado).

I : Intensidad de la corriente; (A)

V_a : Voltaje de arco; (V)

Se aplica flujo de calor por la superficie lateral interior del horno de grafito (4).

$$HFLUX_2 = \frac{Q_{ef}}{A_{lateral}} \quad (4)$$

$$A_{lateral} = \pi \cdot D \cdot h \quad (5)$$

$$Q_{ef} = \eta \cdot I \cdot V_a \quad (6)$$

donde:

$HFLUX_2$: Flujo de calor que se le entra a la pared lateral; (W/m²)

D : Diámetro interior del cuerpo de grafito; (m)

h : Altura interior de cuerpo de grafito; (m)

η : Eficiencia del arco eléctrico en la pared lateral. (Se tomó que la eficiencia del arco en la pared lateral era de 0,1, asumiendo que un 10% del calor generado en el arco se transmite por radiación a esta pared). De esta manera se consideró que un 20% del calor generado se pierde por radiación a la atmósfera circundante y en calentamiento de los electrodos por conducción.

Los resultados del cálculo del flujo de calor que se introduce por la parte superior de la pastilla (1) y por la superficie lateral interior del horno de grafito (4), se muestran en la Tabla 2.

19. Se calcula la distribución de las temperaturas para cada paso de tiempo donde existe arco eléctrico.

20. Se retira la aplicación del flujo de calor.

21. Se aplica convección de calor en la superficie superior de la pastilla y en el lateral interior del horno de grafito (para modelar el enfriamiento del horno, ya que sobre una misma superficie en el mismo paso de tiempo no se puede aplicar convección y flujo de calor).

22. Se establece un nuevo paso de tiempo hasta 600 s, que permita el enfriamiento del horno.

23. Se establece una longitud mínima del sub-paso de tiempo de 0,5 s y una máxima de 20 s.

Tabla 2

Valores del flujo de calor entrados al programa en la pastilla y la pared lateral

I (A)	100	80	60	40
HFLUX1 (W/m ²)	22300885	17840708	13380531	8920354
HFLUX2 (W/m ²)	954907	742705	572944	381963

Resultados

Resultados de la modelación del flujo de calor durante la síntesis SHS-AE

Los resultados obtenidos de la modelación del flujo de calor durante la síntesis SHS-AE en el horno, variando la intensidad de la fuente de energía en 4 valores (100, 80, 60 y 40 A), se muestran con el objetivo de analizar su influencia en la transferencia de calor y en la variación de la temperatura respecto al tiempo en dos puntos de la pastilla de reactantes. Estos puntos corresponden al nodo más cercano a la fuente (centro superior de la pastilla), y al más alejado (extremo inferior).

Una vez introducidos los datos en el programa y corrido el modelo para los 4 casos previstos, se analizan los resultados que entrega el software. Uno de los resultados relevantes iniciales se puede observar en la Figura 5, en la que donde se muestra gráficamente mediante vectores cómo se comporta el flujo de calor por conducción en el modelo, comenzando desde la pastilla de reactantes hacia el crisol de grafito. Se observa además, que el flujo de calor es muy superior en la parte cercana a la pastilla que en las zonas alejadas de ésta, lo que es lógico ya que aquí es donde incide directamente el arco.

Resultados para corrida con intensidad de corriente de la fuente de 100 A

En la Figura 6, se muestra el comportamiento de la temperatura respecto al tiempo de dos nodos seleccionados. El nodo más cercano a la fuente de calor alcanza un máximo de temperatura aproximadamente de 3500 °C a los 90 s, mientras que el nodo alejado alcanza alrededor de 3000 °C. Esta diferencia se debe fundamentalmente a que en el nodo más alejado se encuentra transfiriendo calor por conducción al resto del crisol y a que es el punto de la pastilla más alejado de la fuente de calor. Además, se observa que la pastilla en ambos nodos alcanza con la máxima esta intensidad, la temperatura de 1500 °C casi instantáneamente, marcando el inicio de la formación del SiC. La temperatura sigue aumentando hasta los 60 s en donde alcanza el máximo valor (≈ 3500 °C); el tiempo de permanencia de los nodos en está temperatura es de 60 s y luego el

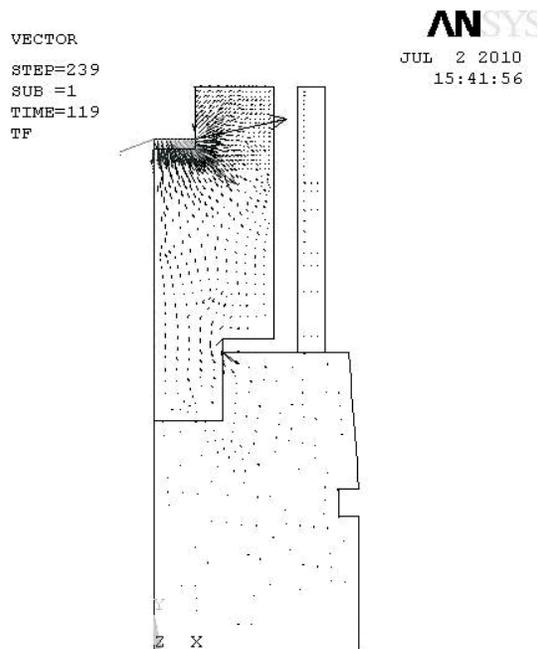


Figura 5. Vectores de transferencia de calor en el modelo.

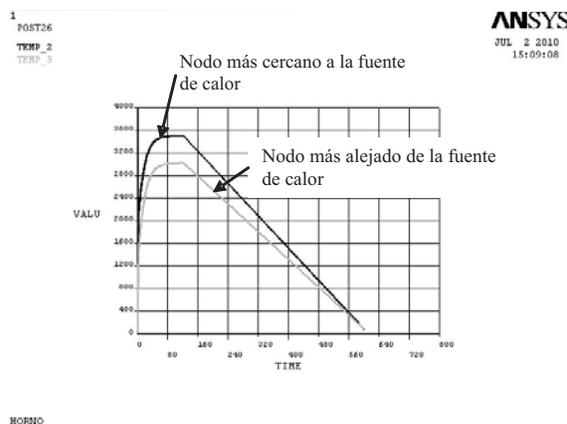


Figura 6. Gráfica de temperatura (°C) respecto al tiempo a intensidad de 100 A.

arco eléctrico se apaga comenzando, a disminuir la temperatura de estos.

Las imágenes que se muestran en la Figura 7 (a, b y c), revelan las isotermas a diferentes tiempos (20, 80 y 120 s) –intensidad de la fuente de 100 A–, resaltando el rápido incremento de la temperatura en la pastilla, dado principalmente por la potencia de la fuente, dimensiones y propiedades de los reactantes, que desde los 20 s alcanza temperaturas superiores a los 3000 °C.

A los 80 s se muestra el calentamiento de la chaqueta aislante en su parte superior por radiación proveniente de la superficie exterior del crisol de grafito (muestra de que el modelo está trabajando la transferencia de calor por radiación de manera lógica), y a los 120 s, no existe un cambio significativo en la temperatura de la pastilla, pero la chaqueta sigue recibiendo radiación y aumentando su temperatura en la parte superior.

Discusión de resultados

Análisis sistémico de los modelos obtenidos

En la Figura 8, se muestra una comparación entre los resultados de todos los modelos obtenidos para las diferentes intensidades de corriente. Se observa, como varía la temperatura en función de la intensidad y de la posición del nodo

respecto al arco eléctrico, a pesar de las pequeñas dimensiones de la pastilla de reactantes, motivado por las propiedades físico-térmica de los reactantes y de los materiales del crisol.

También se puede apreciar en la Figura 8, que en la pastilla, para los cuatro casos de intensidad de corriente analizados luego de un tiempo de arco de 60 s, la temperatura prácticamente se estabiliza en el valor máximo. De esta manera el resto del tiempo, se destinan a completar las reacciones en la pastilla con vista a la obtención del producto cerámico.

En el modelo corrido para 40 A, se observa que la pastilla alcanza los 600 °C casi instantáneamente en todo su volumen, por lo que se funde el aluminio llenando los poros intersticiales y comenzando la reacción redox del SiO₂ para formar el Al₂O₃ con el desprendimiento de energía (no se tuvo en cuenta en este modelo), y la obten-

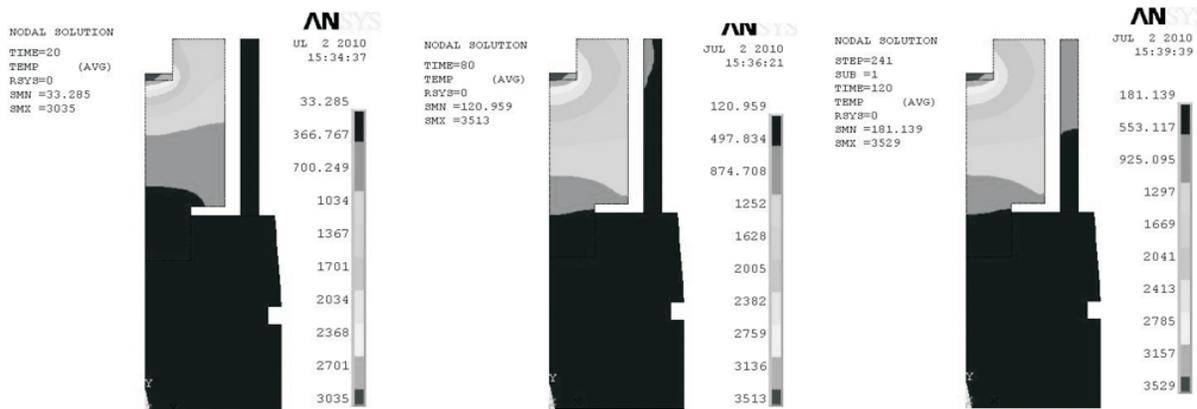


Figura 7. Isotermas del horno con intensidad igual a 100 A; (a) tiempo= 20 s, (b) tiempo= 80 s y (c) tiempo= 120 s.

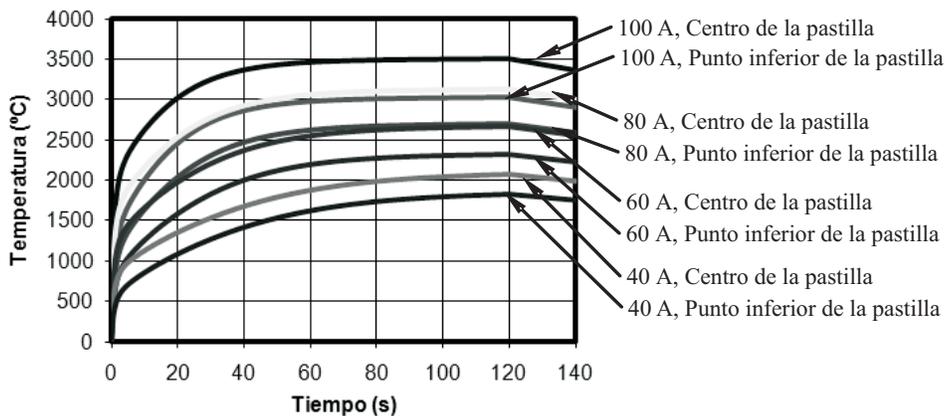


Figura 8. Gráfica de temperatura respecto al tiempo a intensidades de: 100, 80, 60 y 40 A.

ción del Si y otras fases intermedias. A los 30 s aproximadamente ya el centro de la pastilla alcanza los 1500 °C y el nodo más alejado a los 44 s, propiciando la reacción de formación del SiC.

A priori podemos inferir que utilizar una intensidad de 100 A provoca un brusco y elevado calentamiento en la pastilla, propiciando las condiciones energéticas para la ocurrencia de las reacciones involucradas durante la síntesis, pero a su vez ésta pudiera ser la causa de la vaporización de los materiales, tanto de las materias primas como de, los productos intermedios o de los finales, afectando el rendimiento final del proceso.

Desde el punto de vista del aumento del rendimiento del proceso de obtención del material cerámico, producto de la minimización de la pérdidas por vaporización, es de esperar que para los regímenes de 40 y 60 A, los resultados sean superiores ya que las temperaturas máximas alcanzadas son de 2100 y 2600 °C, respectivamente, pero muy inferiores a las alcanzadas para los regímenes de 80 y 100 A.

La modelación permitió además, corroborar que el tiempo de arco establecido de 120 s es adecuado ya que las temperaturas que propician la ocurrencia de las reacciones se alcanzan en un corto período, por lo que extender el tiempo de arco a valores de 300 y 480 s, como se realizó en experimentos reales previos [11, 12], resulta innecesario y provocaría mayor pérdida de elementos por vaporización con el consiguiente gasto innecesario de energía eléctrica.

Conclusiones

1. El modelo de elemento finito desarrollado permitió estudiar el proceso de transferencia de calor en la síntesis por SHS-EA de SiC-Al₂O₃ a diferentes intervalos de intensidad de corriente, lo que facilita establecer criterios cuantitativos de variación de la temperatura respecto al tiempo.
2. Se define que la intensidad óptima de la fuente de calor para lograr una temperatura de 1500 °C en la pastilla de los reactantes, es de 40 A, con lo que disminuirán las pérdidas por vaporización de los productos, con el consiguiente aumento del rendimiento del proceso.

3. Se demuestra que existe una diferencia en la temperatura en las diferentes regiones de la pastilla, pudiendo afectar la obtención de un producto final SiC-Al₂O₃ homogéneo en todo su volumen.

Agradecimiento

A los compañeros del Centro de Ingeniería de Materiales y Nanotecnología del Instituto Venezolano de Investigaciones Científicas (IVIC), por sus importantes aportes en la realización de este trabajo.

Referencias bibliográficas

1. Amroune, A.G., Fantozzi, J.D., Deloume, J.-P., Durand, B. y Halimi, R.: "Formation of Al₂O₃-SiC powder from andalusite and carbon". *Materials Science and Engineering A*, Vol. 290, No. 1-2 (2000) 11-15.
2. Lee, J.H., An, C.Y., Won, C.W., Cho, S.S. y Chun, B.S.: "Characteristics of Al₂O₃-SiC composite powder prepared by the self-propagating high-temperature synthesis process and its sintering behavior". *Materials Research Bulletin*, Vol. 35, No. 1 (2000) 945-954.
3. Kiminami, R.H.G.A., Morelli, M.R., Folz, D.C. y Clark, D.E.: "Synthesis of Al₂O₃-SiC Powders Using Microwave-Induced Combustion Reaction". *Materials Transactions*, Vol. 42, No. 8 (2001) 1661-1666.
4. Han, B. y Li, N.: "Preparation of β-SiC/Al₂O₃ composite from kaolinite gangue by carbothermal reduction". *Ceramics International*, Vol. 31, No. 2 (2005) 227-231.
5. Altinkok., N., Demir., A., Ozsert., I. y Findik., F.: "Compressive Behavior of Al₂O₃-SiC Ceramic Composite Foams Fabricated by Decomposition of Aluminum Sulfate Aqueous Solution". *Journal of Composite Materials*, Vol. 41, No. 11 (2007) 1361-1373.
6. Cihangir, D., Göçmez., H. y Yilmaz., H.: "Dispersion of mechanochemically activated SiC and Al₂O₃ powders". *Materials Science and Engineering*, Vol. 474, No. 1-2 (2007) 32-38.

7. Pushkarev, O. I.: "Production of Abrasive Materials in the SiC-Al₂O₃ System". Refractories and Industrial Ceramics, Vol. 43, No. 11-12 (2002) 8-10.
8. Merzhanov, A. G.: "Reviews - Fundamentals, achievements, and perspectives for development of solid - flame combustion". Russian Chemical Bulletin, Vol. 46, No. 1 (1997) 1-27.
9. Pathak, L.C., Mukherjee, I., Das, S.K., Ganguly, R.G., Ramachandrarao, P. y Bandyopadhyay, D.: "Fabrication of Al₂O₃-SiC in situ composite through a new combustion technique". (1997), Elsevier Science. 75-82.
10. Pozo-Morejón, J.A., Pérez-Hernandez, H., García-Jacomino, J.L., Quintana-Puchol, R. y Quintero-Acosta, P.: "Modelación mediante el método de elementos finitos de la transferencia de calor en proceso de síntesis de material cerámico bajo arco eléctrico", in COMEC 2010. (2010): Santa Clara, Villa Clara, Cuba.
11. García-Jacomino, J.L., González, G., Quintana-Puchol, R., Villalba, R. y Monsalve, A.: "Caracterización de la Cerámica Compuesta SiC-Al₂O₃ Obtenida Mediante Proceso EA-SHS ". Acta Microscópica, Vol. 18, No. C (2009) 243-244.
12. García-Jacomino, J.L., González, G., Quintana-Puchol, R., Villalba, R. y Monsalve, A.: "Obtención y Caracterización del Compuesto Cerámico SiC-Al₂O₃ a Partir de Mineral de Cuarzita y Carbón Vegetal". Acta Microscópica, Vol. 18, No. 1 (2009) 59-66.
13. INC., A.: "Tutorial de Ansys Multiphysics". (2004)
14. Lienhard, J.H.: "A Heat Transfer Textbook". (2002).
15. Matweb: "Table of Total Emissivity". (2012), Available from: www.matweb.com.
16. Incropera, F.P. y Dewitt, D.P.: "Fundamentos de transferencia de calor". Vol. 1. (2001).

Recibido el 16 de Mayo de 2011

En forma de revisada el 10 de Septiembre de 2012