

UNIVERSIDAD DE CHILE FACULTAD DE CIENCIAS FÍSICAS Y MATEMÁTICAS DEPARTAMENTO DE INGENIERÍA MECÁNICA

MODELAMIENTO FLUIDO-DINÁMICO DE MICROTOBERAS DE COLD SPRAY PARA LA DEPOSITACIÓN DE PARTÍCULAS DE COBRE UTILIZANDO MEZCLAS HELIO-NITRÓGENO

MEMORIA PARA OPTAR AL TÍTULO DE INGENIERO CIVIL MECÁNICO

MARIO ALONSO PAROT CABRERA

PROFESOR GUÍA: RUBÉN FERNÁNDEZ URRUTIA

MIEMBROS DE LA COMISIÓN: ÁLVARO VALENCIA MUSALEM RAMÓN FREDERICK GONZÁLEZ

> SANTIAGO DE CHILE 2019

RESUMEN DE LA MEMORIA PARA OPTAR AL TÍTULO DE INGENIERO CIVIL MECÁNICO POR: MARIO ALONSO PAROT CABRERA FECHA: 11 DE ENERO 2019 PROF. GUÍA: RUBÉN FERNÁNDEZ URRUTIA

MODELAMIENTO FLUIDO-DINÁMICO DE MICROTOBERAS DE COLD SPRAY PARA LA DEPOSITACIÓN DE PARTÍCULAS DE COBRE UTILIZANDO MEZCLAS HELIO-NITRÓGENO

El propósito de este trabajo es aplicar modelamiento computacional fluido-dinámico (CFD) para estimar la eficiencia de depósito de partículas de Cobre en el proceso de *Cold Spray* con microtoberas. Con ello se busca estudiar la conveniencia del uso de mezclas Helio-Nitrógeno como gas de trabajo. Esto como una alternativa al uso de Helio puro que presenta un mejor desempeño para este tipo de proceso, pero al mismo tiempo, tiene un costo comercial mayor que el Nitrógeno.

Este trabajo muestra que por medio de la caracterización de las propiedades termodinámicas de las mezclas Helio-Nitrógeno, es posible utilizar herramientas CFD para calcular la velocidad y temperatura de impacto de las partículas, y con ello estimar la eficiencia y factibilidad del proceso.

En total se simulan ocho configuraciones diferentes de microtobera, con largos que varían entre 37 mm y 48 mm y con diámetros de salida que varían entre 2.4 mm y 3 mm.

Se determina que el proceso de *Cold Spray* para partículas de Cobre no es factible para microtoberas de largo menor a 48 mm si se utiliza Nitrógeno puro, siendo la eficiencia máxima obtenible un 39%, lo que está en el límite de factibilidad. Como alternativas para mejorar la eficiencia del proceso aparece el precalentado de las partículas de Cobre y el uso de las mezclas Helio-Nitrógeno. Con respecto a este último punto, a partir del uso de una mezcla con un 28% de Helio (fracción molar), la eficiencia del proceso mejora hasta en un 74%. Mientras que para una mezcla con un 60% Helio, la eficiencia de depósito mejora hasta alcanzar un 90%.

Esta investigación es un avance significativo para reducir el costo operacional de las microtoberas de *Cold Spray*. Además de contribuir con el estudio de nuevas tecnologías de manufactura aditiva con Cobre, el mineral más importante de la industria chilena.

Este trabajo va dedicado muy especialmente a mi madre María Cecilia Cabrera por su apoyo. También lo dedico a las personas formaron parte de mi vida en los años de universidad y que tristemente han partido antes de tiempo.

Agradecimientos

Agradezco sinceramente a mis profesores y miembros de la comisión Rubén Fernández, Álvaro Valencia y Ramón Frederick por su colaboración. Si en el futuro sigo una carrera académica, indudablemente serán referentes para mí.

También agradezco al profesor Aquiles Sepúlveda y a Soledad Morales por su buena disposición en todo momento para todo tipo consultas y trámites que requerí durante este proceso.

Gracias a mi madre María Cecilia Cabrera, por su constante apoyo y su inmenso amor, espero recompensarle algún día todo lo que ha hecho por mí.

A mis abuelos Ilda y Armando que han sido un tremendo apoyo emocional, siempre he considerado su hogar como una zona de tranquilidad y resguardo.

A mi abuela Inés y a mi tío Marcelo Q.E.P.D. Siempre fui bien recibido en su hogar.

A mi padre. Guardo con cariño los años en los que nos sentábamos a hablar de ciencia, fútbol, política, sociedad, etc. Parte de lo que soy hoy es gracias a él.

Gracias a mis hermanas por su apoyo. Espero haber sido un buen ejemplo para ellas, aunque mi hermana Cecilia pasó a ser la hermana mayor porque se tituló antes que yo, jaja.

También mencionar a la familia Avendaño Peralta, que me recibieron en su hogar cuando recién llegué a Santiago. Especialmente dedico este trabajo a don Julio Avendaño Q.E.P.D.

Agradecer a mis compañeros de la U y a mis amistades. A Matías Paredes, que tuvimos la fortuna de coincidir en el liceo y luego en la universidad. A Christofer González, el alumno emblema y el mejor futbolista que he visto en mi vida, una inspiración. Al grupo con el que siempre me junto en Talca, Ángela Zúñiga, Carolina Huacho y Alejando Troncoso. A Cristián Coloma, basta una tarde para notar que la amistad sigue intacta. A los Magios por las risas. Bueno, y así puedo mencionar a muchos más que ya no veo, pero que en algún momento de mi vida fueron muy importantes. Los cabros de Molina; los amigos y vecinos de la Jardín del Valle; mis compañeros del LAM; mis amigos del INSUCO; los Michaud Parra; el Pano y la Fabi; etc.

Finally, special thank you to my girlfriend Lin Yu-Chun and her family for having been part of the greatest adventure I've experienced in my life and also for their support in these years.

Muchas gracias a todas y todos quienes han formado parte de mi vida y han contribuido a formar la persona que soy. Les estaré siempre muy agradecido, de corazón.

Tabla de Contenido

Introducción	1
1. Antecedentes y Objetivos	3
1.1 Antecedentes generales	3
1.2. Motivación	6
1.3 Objetivos y Alcances	7
1.4 Ventajas del proceso de <i>Cold Spray</i>	9
1.5 Aplicaciones del proceso de Cold Spray	11
1.6 Velocidad crítica	12
1.7 Eficiencia de Depósito	13
1.8 Geometría de las microtoberas	14
1.9 Tobera ideal unidimensional	15
2. Modelos y Métodos Numéricos	16
2.1 Modelo para flujo compresible	16
2.2 Método numérico de resolución	23
2.3 Tratamiento de Pared e Inicialización	25
2.4 Modelo de Arrastre de Partículas	31
2.5 Modelo de Intercambio de Calor de la Partícula	34
2.6 Modelo Estocástico	36
3. Metodología	
3.1 Evaluación de los objetivos del trabajo	38
3.2 Pruebas iniciales sin modelo estocástico	40
3.3 Modelo definitivo y Validación	41
3.4 Mezclas binarias Helio-Nitrógeno	44
3.5 Optimización de la geometría de la microtobera	51
3.6 Modelamiento Fluido-dinámico	55
3.6.1 Mallado	55
3.6.2 Configuración de mezclas Helio-Nitrógeno	61
3.6.3 Inicialización y Condiciones de Borde	62

3.6.4 Modelamiento de las partículas	64
4. Resultados	68
4.1 Primeras pruebas con Ansys FLUENT	68
4.2 Validación del modelo definitivo	73
4.3 Caracterización de mezclas Helio-Nitrógeno	81
4.3.1 Nitrógeno puro	82
4.3.2 Resumen de resultados para mezclas	84
4.4 Geometrías de microtobera optimizadas	88
4.5 Resultados de simulaciones fluido-dinámicas	90
4.5.1 Microtobera N°1	90
4.5.2 Resumen de Resultados	105
5. Análisis de Resultados y Conclusiones	
5.1 Análisis de Resultados	
5.2 Conclusiones	
Bibliografía	
Anexos	114
Anexo A – Mallas utilizadas	114
Anexo B – Códigos validación de modelo definitivo	117
Anexo C – Códigos para mezclas binarias	
Anexo D – Resultados caracterización de mezclas	134
D.1 Nitrógeno puro	
D.2 Mezcla 10% Helio	136
D.3 Mezcla 20% Helio	
D.4 Mezcla 28% Helio	
D.5 Mezcla 40% Helio	140
D.6 Mezcla 60% Helio	142
Anexo E – Código para optimización de toberas	144
Anexo F – Código para cálculo de eficiencia	147
Anexo G - Resultados de las simulaciones	151
G.1 Microtobera N°1	151
G.2 Microtobera N°2	156
G.3 Microtobera N°3	161
G.4 Microtobera N°4	
G.5 Microtobera N°5	
G.6 Microtobera N°6	

G.7 Microtobera N°7	
G.8 Microtobera N°8	

Índice de Tablas

Tabla 1.1: Distribución del tamaño de partícula de polvo de Cobre	13
Tabla 2.1: Constantes del modelo k-epsilon estándar	22
Tabla 3.1: Constantes para factor de ponderación de conductividad térmica de mezclas	49
Tabla 3.2: Dimensiones del volumen de control. Microtobera N°1	55
Tabla 3.3: Tamaño de elementos para malla de 235 mil elementos. Microtobera Nº1	56
Tabla 3.4: Tamaño de elementos para malla de 94 mil elementos. Microtobera Nº1.	58
Tabla 3.5: Tamaño de elementos para malla de 400 mil elementos. Microtobera N°1	58
Tabla 3.6: Tamaño de elementos para malla de 400 mil elementos. Microtobera N°1.	58
Tabla 3.7: Velocidad de Impacto de partículas de 5 μm y error asociado para diferentes mallas	59
Tabla 3.8: Configuración en FLUENT de las propiedades termodinámicas del fluido	61
Tabla 3.9: Configuración en FLUENT de condiciones de borde para el inlet del volumen de control	63
Tabla 3.10: Configuración en FLUENT de la discretización numérica	63
Tabla 3.11: Configuración en FLUENT de modelo estocástico Discrete Random Walk	64
Tabla 3.12: Configuración en FLUENT de condiciones de ingreso de las partículas	65
Tabla 3.13: Configuración en FLUENT del modelo de fase discreta	67
Tabla 4.1: Peso molecular [kg/kmol] de mezclas Helio-Nitrógeno	84
Tabla 4.2: Coeficientes para calcular el calor específico Cp [J/kg-K]	86
Tabla 4.3: Coeficientes para calcular conductividad térmica [W/m-K]	86
Tabla 4.4: Constantes de la ley de Sutherland para la Viscosidad [Pa s]	86
Tabla 4.5: Configuración microtobera N°1	88
Tabla 4.6: Configuración microtobera N°2.	88
Tabla 4.7: Resumen de resultados de las ocho configuración optimizadas	89
Tabla 4.8: Tabla Resumen de resultados de las ocho configuraciones de microtobera	105
Tabla A.1: Configuración malla de 235 mil elementos. Microtobera N°1.	114
Tabla A.2: Configuración malla de 250 mil elementos. Microtobera N°2	114
Tabla A.3: Configuración malla de 230 mil elementos. Microtobera N°3	115
Tabla A.4: Configuración malla de 235 mil elementos. Microtobera Nº4	115
Tabla A.5: Configuración malla de 245 elementos. Microtobera N°5	115
Tabla A.6: Configuración malla de 230 mil elementos. Microtobera N°6	115
Tabla A.7: Configuración malla de 250 mil elementos. Microtobera N°7	116
Tabla A.8: Configuración malla de 235 mil elementos. Microtobera N°8	116

Índice de Figuras

Figura 1.1: Esquema simple del proceso de Cold Spray	3
Figura 1.2: Esquema comparativo de procesos de Thermal Spray y Cold Spray	9
Figura 1.3: Geometría y dimensiones de tobera convergente-divergente	14
Figura 2.1: Esquema del Density-based Solver	23
Figura 3.1: Microtobera de Sova junto a moneda de 2 Euros	41
Figura 3.2: Ejemplo de fotografía y detección de trayectorias en partículas de Aluminio	42
Figura 3.3: Velocidades y temperaturas de impacto de partículas de Aluminio	43
Figura 3.4: Variación de la viscosidad de mezclas Helio-Nitrógeno a presión ambiente	47
Figura 3.5: Variación de la conductividad térmica en mezclas Helio-Nitrógeno	48
Figura 3.6: Ejemplo de campo de velocidad de un flujo sobre-expandido a la salida de una tobera	53
Figura 3.7: Representación visual regiones del mallado. Microtobera Nº1	56
Figura 3.8: Representación visual de malla de 235 mil elementos: Microtobera N°1	59
Figura 3.9: Gráfico error de velocidad de impacto vs Número de elementos de la malla.	60
Figura 3.10: Esquema condiciones de borde	62
Figura 3.11: Esquema regiones con diferente tamaño de elementos en el volumen de control	65
Figura 3.12: Esquema inlet del gas de trabajo e inlet de las partículas	66
Figura 3.13: Punto de ingreso de las partículas y trayectoria de las mismas	66
Figura 4.1: Flujo de Helio en microtobera de Sova, con presión de entrada de 2 MPa	69
Figura 4.2: Flujo de Helio en microtobera de Sova, con presión de entrada de 3 MPa	69
Figura 4.3: Velocidad de las partículas de Aluminio vs Distancia recorrida	70
Figura 4.4: Velocidad de las partículas de Cobre vs Distancia recorrida	71
Figura 4.5: Velocidad de las partículas de Zinc vs Distancia recorrida	72
Figura 4.6: Microtobera de Sova junto a moneda de 10 Centavos de Euro	73
Figura 4.7: Campo de velocidades y formación de vórtices a la salida de la microtobera	74
Figura 4.8: Campo de velocidades en microtobera de Sova, con presión de entrada de 5 MPa	75
Figura 4.9: Campo de temperaturas en microtobera de Sova, con presión de entrada de 5 MPa	75
Figura 4.10: Representación visual de la trayectoria y velocidad de 100 partículas de Aluminio	76
Figura 4.11: Velocidad de impacto vs Diámetro de partículas de Aluminio	77
Figura 4.12: Temperatura de impacto vs Diámetro de partículas de Aluminio	78
Figura 4.13: Distribución del tamaño de partícula del polvo de Aluminio	79
Figura 4.14: Predicción de la distribución de la velocidad de las partículas de Aluminio	80
Figura 4.15: Calor específico Cp del Nitrógeno como función de la temperatura	82
Figura 4.16: Conductividad térmica del Nitrógeno como función de la temperatura	83
Figura 4.17: Viscosidad del Nitrógeno como función de la temperatura	83
Figura 4.18: Variación del calor específico Cp para mezclas Helio-Nitrógeno	84

Figura	4.19:	Variación de la conductividad térmica en mezclas Helio-Nitrógeno	85
Figura	4.20:	Variación de la viscosidad en mezclas Helio-Nitrógeno	85
Figura	4.21:	Campo de velocidades de la Microtobera Nº1	90
Figura	4.22:	Campo de temperaturas de la Microtobera Nº1	90
Figura	4.23:	Velocidad de partículas de 5 um para Microtobera Nº1	91
Figura	4.24:	Temperatura de partículas de 5 um para Microtobera Nº1 (Ingreso a 300 K)	91
Figura	4.25:	Temperatura de partículas de 5 um para Microtobera Nº1 (Ingreso a 640 K)	92
Figura	4.26:	Velocidad de partículas de 10 um para Microtobera Nº1	92
Figura	4.27:	Temperatura de partículas de 10 um para Microtobera Nº1 (Ingreso a 300 K)	93
Figura	4.28:	Temperatura de partículas de 10 um para Microtobera Nº1 (Ingreso a 640 K)	93
Figura	4.29:	Velocidad de partículas de 15 um para Microtobera Nº1	94
Figura	4.30:	Temperatura de partículas de 15 um para Microtobera Nº1 (Ingreso a 300 K)	94
Figura	4.31:	Temperatura de partículas de 15 um para Microtobera Nº1 (Ingreso a 640 K)	94
Figura	4.32:	Velocidad de partículas de 20 um para Microtobera Nº1	95
Figura	4.33:	Temperatura de partículas de 20 um para Microtobera Nº1 (Ingreso a 300 K)	95
Figura	4.34:	Temperatura de partículas de 20 um para Microtobera Nº1 (Ingreso a 640 K)	95
Figura	4.35:	Velocidad de partículas de 25 um para Microtobera Nº1	96
Figura	4.36:	Temperatura de partículas de 25 um para Microtobera Nº1 (Ingreso a 300 K)	96
Figura	4.37:	Temperatura de partículas de 25 um para Microtobera Nº1 (Ingreso a 640 K)	96
Figura	4.38:	Velocidad de partículas de 30 um para Microtobera Nº1	97
Figura	4.39:	Temperatura de partículas de 30 um para Microtobera Nº1 (Ingreso a 300 K)	97
Figura	4.40:	Temperatura de partículas de 30 um para Microtobera Nº1 (Ingreso a 640 K)	97
Figura	4.41:	Velocidad de partículas de 35 um para Microtobera Nº1	98
Figura	4.42:	Temperatura de partículas de 35 um para Microtobera Nº1 (Ingreso a 300 K)	98
Figura	4.43:	Temperatura de partículas de 35 um para Microtobera Nº1 (Ingreso a 640 K)	98
Figura	4.44:	Velocidad de partículas de 40 um para Microtobera Nº1	99
Figura	4.45:	Temperatura de partículas de 40 um para Microtobera Nº1 (Ingreso a 300 K)	99
Figura	4.46:	Temperatura de partículas de 40 um para Microtobera Nº1 (Ingreso a 640 K)	99
Figura	4.47:	Velocidad de partículas de 45 um para Microtobera Nº1	100
Figura	4.48:	Temperatura de partículas de 45 um para Microtobera Nº1 (Ingreso a 300 K)	100
Figura	4.49:	Temperatura de partículas de 45 um para Microtobera Nº1 (Ingreso a 640 K)	100
Figura	4.50:	Velocidad de Impacto y Eficiencia con ingreso a 300 K para la Microtobera Nº1	101
Figura	4.51:	Temperatura de Impacto con ingreso a 300 K para la Microtobera Nº1	102
Figura	4.52:	Velocidad de Impacto y Eficiencia con ingreso a 640 K para la Microtobera Nº1	103
Figura	4.53:	Temperatura de Impacto con ingreso a 640 K para la Microtobera Nº1	104

Figura B.1: Archivos de velocidad, temperatura y posición de las partículas en formato .xy	117
Figura C.1: Formato de escritura de la base de datos de las propiedades termodinámicas	123
Figura D.1: Calor específico Cp del Nitrógeno como función de la temperatura	134
Figura D.2: Conductividad térmica del Nitrógeno como función de la temperatura	135
Figura D.3: Viscosidad del Nitrógeno como función de la temperatura	135
Figura D.4: Calor específico Cn de mezclas 10% Helio como función de la temperatura	136
Figura D.5. Conductividad térmica de mezcla 10% Helio como función de la temperatura	136
Figura D.S. Conductividad termica de mezcla 10% Helio como función de la temperatura	130
Figura D.0. Viscosidad de mezela 10% Heno como función de la temperatura	137
Figura D.7. Carductividad térmica da mazala 20% Helio como función de la temperatura	120
Figura D.o. Conductividad termica de mezcla 20% Helio como función de la temperatura	120
Figura D.9: Viscosidad de mezcla 20% Helio como función de la temperatura	120
Figura D.10: Carof específico Cp de mezcia 28% Helio como función de la temperatura	139
Figura D.11: Conductividad termica de mezcia 28% Heno como función de la temperatura	139
Figura D.12: Viscosidad de mezcia 28% Helio como función de la temperatura	140
Figura D.13: Calor especifico Cp de mezcia 40% Helio como funcion de la temperatura	140
Figura D.14: Conductividad termica de mezcla 40% Helio como funcion de la temperatura	141
Figura D.15: Viscosidad de mezcla 40% Helio como función de la temperatura	141
Figura D.16: Calor específico Cp de mezcla 60% Helio como función de la temperatura	142
Figura D.17: Conductividad térmica de mezcla 60% Helio como función de la temperatura	142
Figura D.18: Viscosidad de mezcla 60% Helio como función de la temperatura	143
Figura F.1: Carpetas para datos de velocidad y temperatura de las partículas	147
Figura F.2: Ejemplo nombre de archivos de datos en formato .xy	147
Figura G.1: Campo de velocidades de la Microtobera Nº1	151
Figura G.2: Campo de temperaturas de la Microtobera Nº1	151
Figura G.3: Velocidad de Impacto y Eficiencia con ingreso a 300 K para la Microtobera N°1	152
Figura G.4: Temperatura de Impacto con ingreso a 300 K para la Microtobera Nº1	153
Figura G.5: Velocidad de Impacto y Eficiencia con ingreso a 640 K para la Microtobera N°1	154
Figura G.6: Temperatura de Impacto con ingreso a 640 K para la Microtobera Nº1	155
Figura G.7: Campo de velocidades de la Microtobera Nº2	156
Figura G.8: Campo de temperaturas de la Microtobera N°2	156
Figura G.9. Velocidad de Impacto y Eficiencia con ingreso a 300 K para la Microtobera N°2	150
Figura G.9. Velocidad de Impacto y Encicicida con ingreso a 300 K para la Microtobera N°2	157
Figura C.11: Velocidad de Impacto y Eficiencia con ingreso a 640 K para la Microtobera Nº2	150
Figura G.11: Velocidad de Impacto y Encicicida con ingreso a 640 K para la Microtobera Nº2	160
Figura C 13: Compo do valocidados do la Microtobora Nº3	100
Figura G.13. Campo de temperaturas de la Microtobora Nº2	161
Figura C. 15: Valogidad da Impagto y Efizionaia con ingresso e 200 K nore la Microtakara No2	167
Figura G.15: Velocidad de impacto y Efficiencia con ingreso a 500 K para la Microtobora N°5	162
Figura G.10 ; Temperatura de impacto con ingreso a 500 K para la Microtobora N ⁻⁵	103
Figura G.17 : velocidad de impacto y Efficiencia con ingreso a 640 K para la Microtobera N°3	164
Figura G.10: L'emperatura de Impacto con ingreso a 640 K para la Microtobera N°3	105
Figura G.19: Campo de velocidades de la Microtobera N°4	166
	400

Figura	G.21:	Velocidad de Impacto y Eficiencia con ingreso a 300 K para la Microtobera Nº4	167
Figura	G.22:	Temperatura de Impacto con ingreso a 300 K para la Microtobera Nº4	168
Figura	G.23:	Velocidad de Impacto y Eficiencia con ingreso a 640 K para la Microtobera N°4	169
Figura	G.24:	Temperatura de Impacto con ingreso a 640 K para la Microtobera Nº4	170
Figura	G.25:	Campo de velocidades de la Microtobera N°5	171
Figura	G.26:	Campo de temperaturas de la Microtobera N°5	171
Figura	G.27:	Velocidad de Impacto y Eficiencia con ingreso a 300 K para la Microtobera N°5	172
Figura	G.28:	Temperatura de Impacto con ingreso a 300 K para la Microtobera N°5	173
Figura	G.29:	Velocidad de Impacto y Eficiencia con ingreso a 640 K para la Microtobera N°5	174
Figura	G.30:	Temperatura de Impacto con ingreso a 640 K para la Microtobera N°5	175
Figura	G.31:	Campo de velocidades de la Microtobera N°6	176
Figura	G.32:	Campo de temperaturas de la Microtobera N°6	176
Figura	G.33:	Velocidad de Impacto y Eficiencia con ingreso a 300 K para la Microtobera N°6	177
Figura	G.34:	Temperatura de Impacto con ingreso a 300 K para la Microtobera Nº6	178
Figura	G.35:	Velocidad de Impacto y Eficiencia con ingreso a 640 K para la Microtobera N°6	179
Figura	G.36:	Temperatura de Impacto con ingreso a 640 K para la Microtobera Nº6	180
Figura	G.37:	Campo de velocidades de la Microtobera Nº7	181
Figura	G.38:	Campo de temperaturas de la Microtobera Nº7	181
Figura	G.39:	Velocidad de Impacto y Eficiencia con ingreso a 300 K para la Microtobera N°7	182
Figura	G.40:	Temperatura de Impacto con ingreso a 300 K para la Microtobera Nº7	183
Figura	G.41:	Velocidad de Impacto y Eficiencia con ingreso a 640 K de la Microtobera Nº7	184
Figura	G.42:	Temperatura de Impacto con ingreso a 640 K para la Microtobera Nº7	185
Figura	G.43:	Campo de velocidades de la Microtobera N°8	186
Figura	G.44:	Campo de temperaturas de la Microtobera N°8	186
Figura	G.45:	Velocidad de Impacto y Eficiencia con ingreso a 300 K para la Microtobera N°8	187
Figura	G.46:	Temperatura de Impacto con ingreso a 300 K para la Microtobera N°8	188
Figura	G.47:	Velocidad de Impacto y Eficiencia con ingreso a 640 K para la Microtobera N°8	189
Figura	G.48:	Temperatura de Impacto con ingreso a 640 K para la Microtobera Nº8	190

Introducción

Los procesos de manufactura aditiva con metales están cobrando cada vez mayor importancia en la industria. Estos procesos actualmente son usados para producir recubrimientos metálicos, para reparar piezas mecánicas dañadas, y en un futuro próximo, serán usados para la impresión 3D de metales.

Entre estos procesos se encuentra *Cold Spray*, que consiste en utilizar una tobera y un gas inerte para acelerar y proyectar partículas metálicas sobre un sustrato o superficie de trabajo. Estas partículas se deforman plásticamente al impactar, lo que le proporciona al material depositado mayor dureza y mayor resistencia mecánica.

El gran desafío para el futuro de esta tecnología es reducir el tamaño de las toberas, lo que se traduciría en una menor superficie de dispersión de las partículas. Ello haría factible la impresión 3D de metales con alta resolución, lo que sería un avance tecnológico enorme para la industria.

Sin embargo, para la reducción del tamaño de las toberas, no solo hay impedimentos en cuanto a su diseño y fabricación. También está la necesidad de mantener una alta velocidad de impacto de las partículas, lo que conlleva al empleo de Helio, un gas que permite obtener un buen desempeño pero que al mismo tiempo tiene un alto costo.

El propósito de este trabajo es el diseño de microtoberas de *Cold Spray* para partículas de Cobre empleando mezclas Helio-Nitrógeno como una alternativa al alto costo del Helio y a lo poco efectivo que es el Nitrógeno, la opción más económica para este tipo de proceso.

Para este propósito se diseñan ocho configuraciones diferentes de microtobera, cuyos largos varían entre 37 mm y 48 mm, mientras que sus diámetros de salida varían entre 2.4 mm y 3 mm. El criterio para escoger estas ocho configuraciones es la maximización numérica de la velocidad de salida del gas de trabajo, bajo condiciones de tobera ideal unidimensional e isentrópica. Cada configuración corresponde a una optimización bajo diferentes restricciones. Entre las variables de diseño, está el porcentaje de Helio de la mezcla, que varía entre 0% y 60% (fracción molar).

Una vez obtenidas las ocho configuraciones, la eficiencia de depósito es calculada por medio de modelamiento CFD con fase discreta. En este caso, los modelos del flujo de gas y del arrastre de las partículas son trabajados como modelos desacoplados. El procedimiento para calcular la eficiencia de depósito consiste en caracterizar las propiedades termodinámicas de las mezclas Helio-Nitrógeno en función de la temperatura, utilizando la herramienta computacional Matlab. Estas propiedades son introducidas como *input* en una herramienta de modelamiento CFD. Con ello se calcula el campo de velocidades y de temperaturas del gas dentro de la microtobera cuando se alcanza el régimen estacionario.

Posteriormente, se calculan las velocidades y temperaturas de impacto de las partículas que atraviesan el flujo de gas, y los resultados se comparan con la velocidad crítica necesaria para que se produzca la adhesión de las partículas sobre la superficie de trabajo. Según la relación entre las partículas que no alcanzan la velocidad crítica versus las que alcanzan una velocidad igual o superior, se estima cuál es la eficiencia de depósito del proceso. Es decir, el cociente entre la masa de las partículas que efectivamente se adhieren y depositan sobre la superficie de trabajo versus la masa del total de las partículas proyectadas.

Este trabajo muestra que ante las limitaciones que presenta el uso del Nitrógeno, esencialmente por la baja velocidad que alcanzan las partículas de Cobre, el uso de mezclas con Helio aparece como una alternativa real para mejorar considerablemente la eficiencia de depósito en el proceso de *Cold Spray* con microtoberas.

Si bien, en la actualidad existen microtoberas probadas exitosamente que son incluso más pequeñas que las presentadas en este trabajo, éstas han mostrado tener buenos resultados únicamente utilizando Helio como gas de trabajo y Aluminio como material de depósito.

Así entonces, este trabajo es un primer paso para lograr la impresión de materiales más pesados que el Aluminio o el Titanio, como es el caso del Cobre, con una superficie de dispersión menor a 3 mm. La fabricación de este tipo de dispositivos abriría un nuevo mercado para la manufactura aditiva de Cobre, lo que iría en directo beneficio del país.

Este trabajo también plantea la necesidad de incluir las mezclas Helio-Nitrógeno como un parámetro relevante para el diseño y la optimización de las microtoberas de *Cold Spray*. Ante la posibilidad de obtener una eficiencia de depósito cercana al 100% sin la necesidad de utilizar Helio puro, el uso de mezclas aparece como una alternativa real para la reducción de los costos operacionales de esta tecnología.

El presente informe detalla paso a paso la validación del modelo, la metodología empleada para la caracterización de las mezclas Helio-Nitrógeno, la optimización de la geometría de las microtoberas, el modelamiento fluido-dinámico y el cálculo de la eficiencia de depósito. Junto con ello, se detallan todos los resultados obtenidos en esta investigación.

Capítulo 1 Antecedentes y Objetivos

1.1 Antecedentes generales

El proceso de C*old Spray* es un proceso aditivo que consiste en la proyección de partículas metálicas (o de un material dúctil) sobre un sustrato o superficie de trabajo. Estas partículas son aceleradas por medio de un gas de trabajo, el cual es un gas inerte o poco reactivo. Actualmente las alternativas más usadas son Helio y Nitrógeno.

Este proceso permite producir recubrimientos metálicos conservando buenas propiedades mecánicas y disminuyendo el costo energético en comparación con otros procesos similares como es el caso de *Thermal Spray*. Ambos procesos son comparados en la <u>Sección 1.4</u> de este informe.



El proceso se representa en el siguiente esquema mostrado en la Figura 1.1.



{Figura es una modificación de [1]}

La presión del gas es ajustada por medio de una válvula, hasta un máximo de 3.5MPa o 5MPa según el tipo de equipo que se disponga. Luego el gas es precalentado hasta temperaturas del orden de 500°C. Entonces, el gas presurizado y precalentado pasa por una tobera convergentedivergente del tipo De Laval. Debido a la geometría de la tobera, el gas acelera hasta alcanzar velocidades supersónicas. En la garganta de la tobera o en algún punto posterior a la garganta se conecta un alimentador de polvo que provee las partículas metálicas del proceso.

Las partículas son arrastradas por el gas de trabajo a alta velocidad y salen proyectadas fuera de la tobera impactando sobre un sustrato o superficie de trabajo. Aquellas partículas que impacten a una velocidad mayor a la <u>velocidad crítica</u> se adhieren formando un recubrimiento metálico. Como las partículas se deforman plásticamente al impactar, el material depositado tiene mejores propiedades mecánicas, aunque también puede presentar cierta porosidad según las condiciones particulares del proceso.

El concepto de <u>velocidad crítica</u> es fundamental para el desarrollo de este trabajo de título y es abordado en detalle más adelante en el presente capítulo. Es importante entender que la velocidad crítica impone una velocidad mínima a partir de la cual se produce adhesión entre la partícula y la superficie de trabajo. Esta velocidad crítica es función tanto de la temperatura de impacto como del diámetro de la partícula.

Respecto al flujo de gas, éste alcanza velocidades supersónicas y por ende está sujeto a varios fenómenos, como flujo turbulento, diamantes de choque (*shock diamonds*), flujo subexpandido, flujo sobre-expandido, etc. A su vez, el impacto del gas con la superficie de trabajo produce un choque de arco (*bow shock*) que consiste en la generación de una región de baja velocidad o "colchón de gas" que se forma justo antes de la zona de impacto, lo que puede producir desaceleración de las partículas más pequeñas antes del impacto. Para este trabajo y para la mayoría de los procesos de *Cold Spray*, <u>el choque de arco es considerado despreciable</u>.

Por todo lo anterior, el modelamiento fluido-dinámico (o simplemente CFD, *Computational Fluid-Dynamics*) cobra gran relevancia para poder representar estos fenómenos y caracterizar de forma correcta el flujo presente a través de la tobera y su efecto en la aceleración de las partículas.

Entre los conceptos necesarios para entender el estudio de microtoberas de *Cold Spray* está la <u>velocidad crítica</u> y también la <u>eficiencia de depósito</u>. El primer concepto representa un criterio para determinar si una partícula supera la velocidad necesaria para que se adhiera a la superficie de trabajo. El segundo concepto se refiere al cociente másico entre las partículas que efectivamente se adhieren a la superficie versus el total de partículas que son proyectadas en el proceso.

Para el estudio de microtoberas se hace necesario estimar la <u>eficiencia de depósito</u> del proceso. Así entonces, el modelamiento fluido-dinámico con fase discreta sirve para calcular la velocidad y temperatura de impacto para partículas con diferente diámetro. Mientras que el criterio de <u>velocidad crítica</u> permite determinar cuál es el diámetro de las partículas que efectivamente se adhieren a la superficie de trabajo y cuál es el diámetro de las partículas que no se adhieren. Si la <u>distribución del tamaño de partícula</u> para el polvo metálico es conocida, entonces se puede determinar cuál es la fracción másica de las partículas que cumplen con el criterio de velocidad crítica y cuál es la fracción que no cumple con tal criterio. Así es posible determinar el porcentaje másico de las partículas que efectivamente se adhieren a la superficie respecto al total del polvo metálico utilizado para el proceso.

A modo de ejemplo, si a partir del modelamiento fluido-dinámico con fase discreta y del criterio de <u>velocidad crítica</u> se determina que las partículas con diámetro menor o igual a 42 μm se adhieren a la superficie de trabajo, y de la <u>distribución del tamaño de partícula</u> se sabe que esas partículas representan el 90% del total de la masa de polvo metálico de Cobre, entonces esto significa que la <u>eficiencia de depósito</u> del proceso corresponde a un 90%. Así es posible determinar la eficiencia del proceso de *Cold Spray* para cada una de las microtoberas evaluadas en este trabajo.

La tecnología *Cold Spray* actualmente es utilizada para recubrimientos y para reparar piezas metálicas deterioradas. En un futuro próximo se preveé que esta tecnología también será usada para la <u>impresión 3D de metales</u>. En este sentido es clave reducir el tamaño de las toberas para disminuir la superficie de dispersión de las partículas y así lograr impresiones de alta resolución.

Existen pruebas exitosas con toberas pequeñas y microtoberas para partículas de Aluminio que es un metal ligero (de densidad baja). Pero no así para partículas de Cobre, el cual es un metal más pesado (más denso) y por tanto alcanza velocidades de impacto más bajas, lo que afecta directamente en la eficiencia del proceso. Uno de los desafíos para el desarrollo de esta tecnología es lograr la construcción de microtoberas capaces de depositar Cobre. El término microtobera se refiere a toberas cuyo largo sea menor a 50 mm y diámetro menor a 3 mm.

Otra dificultad en cuanto a esta tecnología es el empleo de Helio como gas de trabajo. Este es un gas de alto costo y además no es renovable. Por esto es fácil entender que el uso de este gas incrementa significativamente los costos operacionales del proceso de *Cold Spray*. Además, se estima que en los próximos años su valor comercial aumentará y hasta la fecha solo existen pruebas existosas en el uso de microtoberas empleando únicamente Helio puro como gas de trabajo.

Aún existen muchos desafíos interesantes para abordar con respecto a esta tecnología, pero su potencial como una alternativa de impresión 3D de metales es enorme. Ejemplo de ello es el trabajo desarrollado por la organización CSIRO de Australia [2].

A continuación, se explican cuáles son las motivaciones para este trabajo de título.

1.2. Motivación

La motivación de este trabajo de título es estudiar la factibilidad del empleo de microtoberas de *Cold Spray* para depositar partículas de Cobre. Éste es un metal de suma importancia para la economía chilena y el desarrollo de un nuevo proceso de manufactura que permita su utilización se traduce en una mayor valoración de este material en el mercado internacional, además de plantear una nueva posibilidad para el desarrollo de manufactura avanzada en Chile.

Para lograr hay algunas consideraciones muy importantes. En primer lugar se desea reducir el tamaño de las microtoberas. Cuanta más pequeña es una microtobera, menor es la superficie de dispersión de las partículas proyectadas. Esto haría factible <u>la impresión 3D de Cobre</u> de alta resolución. Sin embargo, reducir el tamaño de las microtobera también significa reducir el largo de las mismas y aumentar los efectos de pared sobre el flujo de gas. Esto produce una disminución de la velocidad de impacto de las partículas resultando en la disminución de la <u>eficiencia de depósito</u> del proceso. Este concepto es abordado más adelante en el presente capítulo.

Una segunda disyuntiva importante para el desarrollo de esta tecnología es el uso de Helio como gas de trabajo. Aunque es un gas costoso, es el único que ha sido empleado exitosamente en el uso de microtoberas, al contrario de lo que ocurre con Nitrógeno. Por simplicidad de los modelos de simulación de microtoberas, se suele trabajar con Helio o Nitrógeno puro. Sin embargo, en este trabajo de título se plantea el uso de mezclas binarias Helio-Nitrógeno como una alternativa para **reducir el costo operacional** de las microtoberas de *Cold Spray*.

Luego, más allá del desarrollo de este trabajo de título, la idea es generar suficiente información para la construcción de microtoberas de *Cold Spray* que puedan ser testeadas en laboratorio e instaladas en dispositivos CNC como un plan futuro para desarrollar impresoras 3D de Cobre en Chile. Naturalmente, el desarrollo de esta tecnología representa un desafío multidisciplinario en campos como máquinas CNC, robótica, ingeniería de materiales y particularmente en fluido-dinámica, que es lo referente a esta investigación.

Se estima que la industria manufacturera en Chile representa menos del 10% del producto interno bruto nacional [3]. El desarrollo de la impresión 3D con Cobre podría impulsar en el corto plazo la fabricación de productos tales como intercambiadores de calor de microcanales [4]. En el mediano y largo plazo, con el avance de la robótica y la automatización de procesos, se podrían fabricar productos de Cobre de mayor complejidad y a mayor escala, lo que iría en directo beneficio de la industria manufacturera nacional.

Este trabajo de título representa entonces un primer paso para el diseño de microtoberas de *Cold Spray* que permitan en un futuro la impresión 3D piezas y productos en Cobre.

1.3 Objetivos y Alcances

El objetivo general de este trabajo es utilizar modelamiento CFD para lograr el diseño de microtoberas de *Cold Spray* para partículas de Cobre usando mezclas Helio-Nitrógeno.

Los objetivos específicos son presentados a continuación. Mayor detalle de cada uno de ellos se presenta en el capítulo de Metodología del presente trabajo.

Los objetivos específicos de este trabajo son:

- Validar un conjunto de modelos pre-existentes utilizados en literatura relevante.
- Definir numéricamente las propiedades termodinámicas de mezclas Helio-Nitrógeno para ser usadas como *input* en el modelamiento CFD de microtoberas.
- Seleccionar ocho configuraciones diferentes de microtobera maximizando la velocidad de salida del gas de trabajo bajo condiciones de tobera ideal unidimensional e isentrópica.
- Simular el flujo de gas con el modelo ya validado, incorporando el uso de mezcla Helio-Nitrógeno. Todo esto para diferentes configuraciones de microtoberas de *Cold Spray*.
- Modelar el arrastre de las partículas por acción del gas de trabajo, utilizando los modelos ya validados para estimar la velocidad y temperatura de impacto de las partículas de Cobre.
- Usar la velocidad y temperatura de impacto de las partículas para estimar la eficiencia de depósito, es decir, el cociente másico entre las partículas que se adhieren a la superficie de trabajo versus el total de partículas proyectadas.

Los alcances de este trabajo son los siguientes:

- Se diseñan <u>ocho configuraciones de microtobera</u> diferentes con largos desde 37 mm hasta 48 mm, con diámetros de salida que varían entre 2.4 mm y 3 mm, y con mezclas Helio-Nitrógeno cuya fracción molar de Helio varía entre 0% y 60%.
- Se evalúa la eficiencia de depósito <u>únicamente para partículas de Cobre</u>, dado que éste es uno de los metales que ha mostrado menos éxito en el estudio de microtobera. De esta manera no se estudian otros metales menos densos como Aluminio o Titanio, puesto que estos metales ya han sido probados exitosamente para este proceso.
- Este trabajo <u>no incluye la validación experimental</u> de los resultados. Por esta razón se escoge como base los trabajos de Alexey Sova, quien ha validado experimentalmente sus modelos para simulación de microtoberas de *Cold Spray*.
- Los modelos del flujo de gas y del arrastre de las partículas se trabajan desacoplados. Esto significa que el flujo de gas es modelado en modo transiente hasta alcanzar régimen estacionario. Luego, las partículas son añadidas para calcular el efecto de la fuerza de arrastre que produce el gas sobre éstas, y así obtener la velocidad y temperatura de impacto de cada partícula. Al ser modelos desacoplados, se asume que el flujo de la partícula no afecta el campo de velocidades ni el campo de temperaturas del mismo gas.
- **Las partículas se modelan individualmente** y no como un flujo de partículas. Esto quiere decir que se modela el arrastre de una partícula hasta que ésta sale del volumen de control, luego se modela la siguiente partícula y así sucesivamente.
- Los resultados varían entre partículas del mismo tamaño y para iguales condiciones de operación debido al modelo estocástico *Discrete Random Walk*. Para aplicar este modelo se hacen 100 lanzamientos de partículas para 9 tamaños de partículas diferentes y dos temperaturas de ingreso a la tobera diferentes, dando un total de 1800 lanzamientos de partículas para cada configuración de microtobera. Al estudiar ocho configuraciones de microtobera diferentes, en total <u>se evalúan 14.400 partículas</u> para la realización de este trabajo de título.
- El fenómeno de *Bow Shock* se considera despreciable y no es modelado. El fenómeno de *Bow Shock* consiste en una región de baja velocidad del gas o "colchón de gas" que se produce en la zona de impacto por la bifurcación del gas que intenta atravesar la superficie de trabajo que representa un obstáculo. El fenómeno de *Bow Shock* puede producir la desaceleración de partículas del orden de 5 μm y 10 μm , que son partículas con alta probabilidad de adhesión en el proceso de *Cold Spray*. De allí que es válido considerar este fenómeno como despreciable.
- Este trabajo <u>no incluye una evaluación económica</u> del consumo de gas de trabajo ni del desperdicio de polvo metálico que se produce durante el proceso de *Cold Spray*. No se calculan ni se comparan los costos operacionales de las ocho microtoberas seleccionadas.

1.4 Ventajas del proceso de Cold Spray

El proceso de *Cold Spray* fue originalmente desarrollado a mediados de los 80's en el Instituto de Mecánica Teórica y Aplicada de la Academia Rusa de Ciencias. Ellos lograron exitosamente depositar una gran variedad de metales puros, aleaciones y materiales compuestos. En Estados Unidos, el estudio del proceso inició a mediados de los 90's por parte del NCMS (*National Center of Manufacturing Sciences*), captando el interés de empresas como Ford, General Motors y General Eletric-Aircraft Engines, entre otras [5]. En la actualidad, las aplicaciones del proceso de *Cold Spray* despiertan interés en todo el mundo, existiendo centros que se dedican a su estudio en Alemania, Australia, Canadá, China, Estado Unidos, Francia, Rusia, etc.

Cold Spray pertenece a la familia de procesos de manufactura aditiva junto a otros procesos como el *Thermal Spray*. Estos procesos se diferencian en que *Cold Spray* ocurre en todo momento con partículas en estado sólido que impactan a temperaturas por debajo del punto de fusión y a altas velocidades, impulsadas por un gas inerte supersónico. Por el contrario, en el proceso de *Thermal Spray*, el gas que impulsa a las partículas es calentado hasta convertirse en plasma, y por lo tanto, el polvo metálico utilizado es derretido y esparcido sobre la superficie de trabajo. Un esquema comparando ambos procesos se muestra en la <u>Figura 1.2</u>.



Figura 1.2: Esquema comparativo de procesos de Thermal Spray y Cold Spray

{Figura es una modificación de [1] y [6]}

El proceso de *Cold Spray* tiene algunas desventajas respecto al *Thermal Spray*, por ejemplo, al no ser factible su uso para depositar cerámicos, o al producir alto desgaste en elementos como las toberas. Sin embargo, sus ventajas son mucho más significativas y eso lo convierte en un proceso muy competitivo respecto a otras tecnologías.

La primera ventaja competitiva del proceso de *Cold Spray* por sobre el *Thermal Spray* es el **consumo energético**. Mientras *Thermal Spray* requiere de calentar el gas al punto de producir plasma y derretir las partículas, en el proceso de *Cold Spray* las partículas se mantienen en estado sólido en todo momento y el gas no sufre cambio de estado a plasma.

La segunda ventaja tiene que ver con las **propiedades mecánicas** del material depositado. En el *Thermal Spray* las partículas impactan estando parcialmente derretidas y la cristalización se produce posterior al impacto, por lo que el material presenta menos deformación plástica, y por lo tanto, menos dureza y resistencia mecánica. Por el contrario, en el proceso de *Cold Spray* las partículas impactan en estado sólido y se deforman plásticamente, resultando en un material más resistente y con mejores propiedades mecánicas. El material depositado mantiene la microestructura inicial que tiene el polvo metálico, a diferencia del *Thermal Spray*.

Otra ventaja del proceso de *Cold Spray* es permitir obtener <u>menos oxidación</u>. Ambos procesos requieren del uso de gases con ausencia de oxígeno, para evitar la oxidación. Sin embargo, durante el almacenamiento de las partículas y su incorporación en el proceso, es inevitable la presencia de pequeñas cantidades de oxígeno. Las partículas utilizadas en el proceso de *Thermal Spray* son más suceptibles a sufrir oxidación por las altas temperaturas alcanzadas. Mientras que para el caso del *Cold Spray*, la oxidación producida es menor. Incluso, materiales como el Aluminio y el Titanio pueden oxidarse al punto de no adherirse a la superficie de trabajo, haciendo del *Cold Spray* la mejor alternativa para estos metales. La oxidación también afecta significativamente al Cobre, siendo nuevamente *Cold Spray* más ventajoso que *Thermal Spray* en este aspecto.

Junto a todas estas ventajas, el proceso de *Cold Spray* se espera que sea usado en un futuro próximo para la **impresión 3D de metales**. *Cold Spray* es más competitivo que la impresión 3D por láser en cuanto a la tasa o rapidez de depósito del material, aunque aún no logra tener la misma resolución de impresión que sí puede alcanzar la tecnología láser.

Los desafíos futuros en esta materia son la reducción del tamaño de las microtobera para permitir impresiones de alta resolución, la reducción de la cantidad de Helio utilizado en el proceso, el cual es un gas de alto costo y no-renovable, y la predicción de las propiedades mecánicas del material depositado a partir de simulaciones computacionales.

Este trabajo de título aborda dos de los tres puntos recién mencionados. Enfocándose en el estudio del proceso para partículas de Cobre, lo que va en directo beneficio de la industria nacional.

1.5 Aplicaciones del proceso de Cold Spray

La tecnología es ampliamente usada para producir recubrimientos metálicos. Entre las aplicaciones destacadas en esta materia están los recubrimientos con Cobre en recipientes contenedores de residuos radiactivos. En este sentido destaca el trabajo del profesor Rubén Fernández (profesor guía de este trabajo) en el estudio del depósito de Cobre sobre Acero [7].

Otra aplicación interesante es el uso de *Cold Spray* para reparar piezas mecánicas deterioradas. Existen experiencias exitosas incluso a nivel comercial en la reparación de piezas usando *Cold Spray* y posterior mecanizado (maquinado) por ejemplo con la empresa Moog que trabaja en la reparación de soportes de rodamientos, cajas de engranes, marcos frontales de motores y carcasas varias. Más información puede ser encontrada en [8].

En la actualidad se trabaja en el desarrollo de la impresión 3D de metales por medio de esta tecnología. Se puede destacar el trabajo que hace el CSIRO de Australia [2], donde actualmente es investigador Alejandro Vargas, Doctor en Ciencia de los Materiales de la Universidad de Chile, quien además fue académico del Departamento de Ingeniería Mecánica de la universidad.

Aunque la impresión de metales es factible para cualquier tamaño de tobera, una impresión de alta resolución (alta definición) solo es factible con microtoberas suficientemente pequeñas para que la superficie de las partículas sea la menor posible. En este sentido destacan los trabajos del investigador Alexey Sova, quien cuenta con la microtobera más pequeña en la actualidad, cuyo diámetro de salida es de 1 mm. Sova ha logrado exitosamente depositar partículas de Aluminio con esta microtobera utilizando Helio como gas de trabajo [9].

A diferencia de otros procesos como *Thermal Spray*, el proceso de *Cold Spray* permite depositar materiales sensibles a la oxidación, como es el caso del Aluminio, el Titanio, el Cobre e incluso de Carburo de Tungsteno. También permite depositar materiales con un alto punto de fusión como es el Tantanio, el Niobio y las superaleaciones metálicas.

Las aplicaciones de *Cold Spray* son diversas y su potencial es enorme. Con la rápida expansión que está teniendo el uso de Máquinas CNC y con los avances recientes en Robótica y automatización de procesos, se espera que la próxima década será clave para que esta tecnología sea empleada exitosamente en la impresión 3D de varios metales, incluyendo el Cobre.

1.6 Velocidad crítica

Para entender cómo las partículas se adhieren a otra superficie, se debe manejar el criterio de <u>velocidad crítica</u>. Este criterio se usa en el modelamiento CFD de microtoberas para determinar cuáles son las partículas que efectivamente se adhieren a la superficie de trabajo durante el proceso.

Cuando la partícula impacta sobre la superficie de trabajo, toda la energía cinética de traslación de la partícula es convertida abruptamente. La partícula se deforma plásticamente aumentando su superficie de contacto con el sustrato o el material ya depositado. El roce entre la partícula y la superficie de trabajo produce un aumento local de temperatura en el borde de la partícula, puesto que este fenómeno ocurre con mayor rapidez que la disipación de calor a través de la superficie de trabajo o de la misma partícula. Este aumento local de temperatura, sumado a una alta presión local, superior a la presión de fluencia del material, propician la formación de enlaces metálicos entre la partícula y la superficie de trabajo.

Una hipótesis es que la posibilidad de que una partícula metálica se adhiera está relacionada con su estado inicial justo antes del impacto, es decir, con su tamaño, velocidad (energía cinética) y temperatura (energía térmica). Luego, durante el impacto, parte de esta energía se concentra en los bordes de la partícula para propiciar la formación de enlaces. Se puede deducir entonces que una de las variables que determina la velocidad crítica es la temperatura de impacto. La segunda variable, en tanto, es el tamaño de la partícula. En efecto, se puede inferir que para dos partículas de igual velocidad y temperatura, pero de diferente tamaño, la partícula de mayor tamaño tiene más energía en su estado inicial y por lo tanto, tiene más posibilidades de adherirse.

El trabajo de Hamid Assadi y otros autores "*On parameter selection in Cold Spraying*" [10] establece que las principales variables para determinar la velocidad crítica son la temperatura de impacto y el diámetro de la partícula. Además establece que para igual temperatura de impacto, las partículas de mayor tamaño requieren de una velocidad menor para adherirse. La fórmula de velocidad crítica para el caso del Cobre, extraída de [10] y [11], se muestra a continuación.

Definición 1.1: Velocidad crítica de las partículas de Cobre

$$v_{cr} = 650 \left[\frac{m}{s}\right] \cdot \frac{0.42 \sqrt{\frac{dp}{10[\mu m]} \cdot \left(1 - \frac{T_{pi}}{T_m}\right)} + \sqrt{1 - 0.73 \frac{T_{pi}}{T_m}}}{0.65 + \sqrt{\frac{dp}{10[\mu m]}}}$$
(1.1)

•	v _{cr} : Velocidad crítica	[m/s]
•	d _p : Diámetro de partícula	$[\mu m]$
•	T _{pi} : Temperatura de Impacto	[K]
•	T _m : Temperatura de fusión	[K]

1.7 Eficiencia de Depósito

La <u>eficiencia de depósito</u> es el porcentaje de masa de polvo metálico que efectivamente se deposita sobre el sustrato versus la masa total de polvo metálico que es utilizado.

Definición 1.2: Eficiencia de depósito del proceso de Cold Spray

$$\eta_{cold \; Spray} = \frac{m_{p.adheridas}}{m_{p.proyectadas}} \cdot 100\% \tag{1.2}$$

- η_{Cold Spray}: Eficiencia de depósito del proceso de Cold Spray [%]
- m_{p.adheridas}: Masa de las partículas adheridas [kg]
- *m_{p.proyectadas}: Masa del total de partículas proyectadas* [*kg*]

Experimentalmente es fácil de determinar simplemente pesando la fracción de polvo que es depositado versus el total de polvo metálico que es usado en el proceso. Sin embargo, para modelamiento CFD, esto no es tan trivial. El primer paso es determinar la velocidad y temperatura de impacto para cada tamaño de partícula. El siguiente paso es evaluar la <u>velocidad crítica</u>, luego se establece que todas las partículas cuya velocidad de impacto sea menor a la velocidad crítica no se adhieren, mientras que las partículas con una velocidad mayor sí lo hacen. Con esto se determina un <u>diámetro de partícula crítico</u> a partir del cual se produce la adhesión con la superficie.

Esto es lo que se suele observar en el proceso de *Cold Spray*. Las partículas de mayor tamaño son las que <u>no</u> suelen adherirse, puesto que aunque necesitan una menor velocidad crítica, al mismo tiempo alcanzan velocidades más bajas por ser partículas más pesadas. Mientras que las partículas más pequeñas, si bien requieren de velocidades más altas para adherirse, suelen alcanzar velocidades suficientes por la gran aceleración que experimentan por acción de la fuerza de arrastre que ejerce el gas de trabajo. Así entonces, conociendo este <u>diámetro crítico</u> y asumiendo que se produce adhesión para las partículas de menor tamaño, se puede determinar qué porcentaje de la masa total del polvo metálico se adhiere a la superficie de trabajo si la <u>distribución del tamaño de partícula</u> en el polvo es conocida. Para el caso de este trabajo, la distribución del porcentaje másico del polvo comercial de Cobre se extrae del paper [12] y se presenta a continuación en la <u>Tabla 1.1</u>.

Diámetro de partícula	<1[µm]	<11[µm]	<24[µm]	<42[µm]	<50[µm]
Porcentaje Másico	0%	10%	50%	90%	100%

Tabla 1.1: Distribución del tamaño de partícula de polvo de Cobre

{Tabla elaborada con datos de [12]}

Esto quiere decir, por ejemplo, que del total de partículas, las partículas de menos de 24 μm representan el 50% de la masa del polvo, mientras que las partículas de menores a 42 μm representan el 90% de la masa total del polvo de Cobre.

1.8 Geometría de las microtoberas

Microtobera es un nombre que se suele dar a toberas de tamaño pequeño. Por tamaño pequeño se entiende toberas cuyo <u>largo de la región divergente</u> sea menor a 50 mm y cuyo <u>diámetro de salida</u> sea menor a 3 mm. Para entender mejor a qué se refieren estas medidas, a continuación se muestra la <u>Figura 1.3</u>. Esta figura es una modificación de la imagen que aparece en [13].



Figura 1.3: Geometría y dimensiones de tobera convergente-divergente D_{in} : Diámetro de Entrada, D_{cr} : Diámetro de Garganta, D_e : Diámetro de Salida

El <u>diámetro de entrada</u> se refiere al diámetro en la zona donde ingresa el gas a la tobera. Por otra parte, el <u>diámetro de garganta</u> se refiere al diámetro menor de la tobera. La zona comprendida entre el diámetro de entrada y el diámetro de garganta se conoce como <u>sección convergente</u> y corresponde a la zona donde el gas pasa de velocidades muy bajas a alcanzar un número de Mach cercano a uno (velocidad cercana a la del sonido). La inyección de las partículas en el proceso de *Cold Spray* suele ocurrir en la garganta o un poco después de la garganta. Esto para disminuir el riesgo de que algunas partículas impacten con las paredes de la tobera y luego de algún tiempo de operación se produzca un tapón.

El <u>diámetro de salida</u>, en tanto, es el diámetro de la zona donde termina la tobera y en definitiva tanto el gas de trabajo como las partículas salen expulsadas. La región comprendida entre el diámetro de garganta y el diámetro de salida se conoce como <u>sección divergente</u>. El <u>largo de la</u> <u>sección divergente</u> es de gran importancia, pues cuanto mayor distancia recorren las partículas dentro de la tobera, mayor será la aceleración, y por lo tanto, mayor la velocidad de impacto.

La región entre el diámetro de salida y la <u>superficie de trabajo</u> se conoce como <u>región de</u> <u>free jet</u>. Ésta es la región en la que las partículas transitan hasta antes del impacto. La distancia entre la salida de la tobera y la superficie de trabajo se conoce como <u>distancia de impacto</u>.

Para el diseño de microtoberas, y toberas en general, la sección más relevante es la sección divergente, por lo tanto hay tres parámetros fundamentales que definen la geometría de una tobera. Ellos son diámetro de garganta, diámetro de salida y largo de la sección divergente.

[{]Figura es una modificación de [13]}

1.9 Tobera ideal unidimensional

Otro concepto importante de manejar en el estudio de microtoberas es del de tobera ideal unidimensional e isentrópica. Una tobera ideal e isentrópica es aquella tobera con paredes adiabáticas y que trabaja con un gas ideal. Por lo tanto se puede asumir que el gas de trabajo dentro de la tobera sufre una expansión adiabática regida por el coeficiente de dilatación adiabática, o también conocido como razón de calor específico o factor de expansión isentrópica. Usualmente representado por la letra gamma (γ).

Este supuesto es muy útil para desprenderse de la dependencia de la presión y calcular las propiedades del gas de trabajo únicamente en términos de la temperatura. Esto no es solo útil para trabajar con aproximaciones simples, sino que también cuando se utiliza modelamiento fluidodinámico en un plano 2D axisimétrico, como es el caso de este trabajo. Puesto que, para asignar como *input* propiedades termodinámicas del gas de trabajo definidas por el usuario (como es el caso cuando se trabaja con mezclas Helio-Nitrógeno) la herramienta CFD pide que estas propiedades estén definidas únicamente en términos de la temperatura.

Por otra parte, al asumir que la tobera es unidimensional, simplemente se ignora el perfil de velocidades y se asume que la velocidad del gas depende únicamente de la posición con respecto al eje de las abscisas (eje axial de la tobera). Este supuesto sirve para simplificar el cálculo de la velocidad del gas de trabajo y así poder proceder con su optimización numérica.

Para condiciones de tobera ideal unidimensional e isentrópica, el número de Mach a la salida de la tobera depende únicamente de la geometría de la tobera, mientras que la velocidad del sonido a la salida de la tobera depende del mismo número de Mach y de las propiedades termodinámicas del gas de trabajo. Esto permite que se pueda estimar la velocidad de salida del gas únicamente a partir de parámetros como el <u>diámetro de garganta</u> de la tobera, el <u>diámetro de salida</u> de la tobera, y la <u>fracción molar de Helio</u> en el gas de trabajo.

Como no es factible simular bidimensionalmente un gran número de microtoberas, usar el supuesto de tobera ideal unidimensional e isentrópica sirve para optimizar la geometría de éstas en una primera instancia, para luego proceder al modelamiento CFD y así obtener resultados de mayor validez para el estudio del proceso.

Un criterio simple para optimizar microtoberas es maximizar la velocidad de salida del gas de trabajo. Aunque para llevar a cabo la optimización es importante tomar ciertas consideraciones que son explicadas más adelante en el presente informe.

Capítulo 2 Modelos y Métodos Numéricos

2.1 Modelo para flujo compresible

Las toberas son ampliamente usadas en ingeniería para acelerar un flujo de gas con distintos propósitos. Asumiendo un proceso isentrópico y unidimensional, es decir, una tobera ideal, la ecuación que gobierna a la tobera está dada por la siguiente expresión:

Definición 2.1: Efecto del número de Mach en toberas ideales

$$\frac{dV}{V} \cdot \left(M^2 - 1\right) = \frac{dA}{A} \tag{2.1}$$

•	V: Velocidad media del gas	[m/s]
•	M: Número de Mach del gas	[adimensional]
•	A: Área de la sección transversal de la tobera	$[m^2]$

Cuando M < 1, es necesario reducir el área para producir un aumento de velocidad. En tanto que cuando M > 1, se debe aumentar el área para producir aumento de velocidad. Así entonces se puede explicar la geometría "convergente-divergente" de las toberas.

A partir de este resultado de tobera ideal unidimensional, se obtienen las ecuaciones que permiten obtener la temperatura, presión y velocidad del gas en cada punto al interior de la tobera, como se muestra a continuación. Sin embargo, es importante mencionar que esta aproximación no permite modelar la turbulencia que se produce dentro de la tobera.

Definición 2.2: Ecuaciones de temperatura, presión y densidad dentro de la tobera ideal

$$\frac{T_0}{T} = 1 + \frac{\gamma - 1}{2} \cdot M^2 \tag{2.2.1}$$

$$\frac{P_0}{P} = \left(1 + \frac{\gamma - 1}{2} \cdot M^2\right)^{\frac{\gamma}{\gamma - 1}}$$
(2.2.2)

$$\frac{\rho_0}{\rho} = \left(1 + \frac{\gamma - 1}{2} \cdot M^2\right)^{\frac{1}{\gamma - 1}}$$
(2.2.3)

•	T: Temperatura actual del gas	[K]
•	T ₀ :Temperatura inicial del gas en el reservorio	[K]
•	P: Presión actual del gas	[MPa]
•	P ₀ :Presión inicial del gas en el reservorio	[MPa]
•	ρ: Densidad actual del gas	$[kg/m^3]$
•	$ ho_0$:Densidad inicial del gas en el reservorio	$[kg/m^3]$
•	M: Número de Mach del gas	[adimensional]
•	γ: Coeficiente de dilatación adiabática del gas	[adimensional]

Para modelar el efecto de la turbulencia existen otras alternativas, como los modelos $k - \sigma$ y el modelo de Spalart-Allmaras, aunque los modelos $k - \varepsilon$ son los más usados en ingeniería para este tipo de problemas, incluyendo el caso del análisis del proceso de *Cold Spray*.

Los modelos $k - \varepsilon$ añaden dos ecuaciones a las ecuaciones de masa, momentum y energía interna (ecuaciones RANS), esto con el objetivo de modelar el efecto de la turbulencia. Para lograr esto se añaden dos variables nuevas, una es la variable k de energía cinética por turbulencia y la segunda es ε que es la tasa de disipación de la energía cinética por turbulencia.

La familia de modelos $k - \varepsilon$ trabaja bien para modelar el flujo en regiones lejanas de las condiciones de borde, no así en regiones cercanas (como las zonas adyacentes a paredes), para cuyo propósito existen los modelos $k - \sigma$. Por otro lado, el modelo Spalart-Allmaras tiene una ecuación menos y es ampliamente usado en la industria aeroespacial.

Para el caso del Cold Spray, los modelos $k - \varepsilon$ son los más usados puesto que siempre la idea es simular un flujo compresible a velocidad supersónica, sin importar demasiado lo que ocurre las regiones cercanas a las paredes, sino más bien, importan las regiones cercanas al centro de la microtobera por donde transitan las partículas antes de salir proyectadas. En particular, el trabajo de Sova [9] propone el uso del modelo $k - \varepsilon$ estándar para el estudio de las microtoberas. Las ecuaciones que rigen a este modelo se ven a continuación.

Definición 2.3: *Ecuaciones del modelo* $k - \varepsilon$ *estándar.*

Ecuación de Continuidad

$$\frac{\partial(\rho u_i)}{\partial x_i} = 0 \tag{2.3.1}$$

Ecuación de Momentum

$$\frac{\partial(\rho u_i u_j)}{\partial x_j} = -\frac{\partial p}{\partial x_i} + \frac{\partial}{\partial x_j} \left[\mu \cdot \left(\frac{\partial u_i}{\partial x_j} + \frac{\partial u_j}{\partial x_i} - \frac{2}{3} \cdot \delta_{ij} \cdot \frac{\partial u_l}{\partial x_l} \right) \right] + \frac{\partial}{\partial x_j} \left(-\rho \overline{u'_i u'_j} \right)$$
(2.3.2)

Ecuación de Energía Interna

$$\frac{\partial(\rho u_i c_p T)}{\partial x_i} = \frac{\partial}{\partial x_j} \left[\left(\lambda + \frac{c_p \cdot \mu_t}{P r_t} \right) \frac{\partial T}{\partial x_i} + u_i \cdot \left(\tau_{ij} \right)_{eff} \right] - p \frac{\partial u_i}{\partial x_i} + Sc$$
(2.3.3)

Ecuación de Energía cinética turbulenta

$$\frac{\partial(\rho u_i k)}{\partial x_i} = \frac{\partial}{\partial x_j} \left[\left(\mu + \frac{\mu_t}{\sigma_k} \right) \frac{\partial k}{\partial x_j} \right] + G_k + G_b - \rho \varepsilon - Y_M + S_k$$
(2.3.4)

Ecuación de la Tasa de disipación de la energía cinética turbulenta

$$\frac{\partial(\rho u_i \varepsilon)}{\partial x_i} = \frac{\partial}{\partial x_j} \left[\left(\mu + \frac{\mu_t}{\sigma_{\varepsilon}} \right) \frac{\partial \varepsilon}{\partial x_j} \right] + C_{1\varepsilon} \cdot \frac{\varepsilon}{k} \cdot (G_k + C_{3\varepsilon} G_b) - C_{2\varepsilon} \rho \frac{\varepsilon^2}{k} + S_{\varepsilon}$$
(2.3.5)

 ρ: Densidad del gas 	$[kg/m^3]$
• <i>u_i: Velocidad del gas en la coordenada i</i>	[m/s]
• x _i : Posición en la coordenada i	[m]
• p: Presión del gas	[<i>Pa</i>]
 μ: Viscosidad nominal del gas 	$[Pa \cdot s]$
 μ_t: Viscosidad turbulenta del gas 	$[Pa \cdot s]$
• δ_{ij} :Delta de Kronecker	[adimensional]
 λ: Conductividad térmica del gas 	$[W/m \cdot k]$
• <i>C_p: Calor específico del gas</i>	$[J/kg \cdot K]$
• Pr _t :Número de Prandtl turbulento	[adimensional]
• T: Temperatura del gas	[<i>K</i>]
• τ_{ij} :Tensor de esfuerzos	[<i>Pa</i>]
Sc: Número de Schmidt	[Pa/s]
• <i>G_k:Generación de energía cinética turbulenta</i>	[Pa/s]
• <i>G_b:Efecto de la gravedad en el flujo turbulento</i>	[Pa/s]
• Y _M :Efecto de la compresibilidad	[Pa/s]
• $C_{1\varepsilon}, C_{2\varepsilon}, C_{3\varepsilon}$:Constantes del modelo	[adimensional]
• <i>S_k: Constante definida por el usuario</i>	[Pa/s]
• S_{ε} : Constante definida por el usuario	$[Pa/s^2]$
10	

Más detalle de estas ecuaciones puede encontrarse en [3]. También es importante mencionar que estas ecuaciones son válidas en estado estacionario y en este caso son trabajadas en un plano **bidimensional axisimétrico**. El término $-\rho \overline{u'_i u'_j}$ es conocido como los esfuerzos de Reynolds (*Reynolds stresses*), y puede ser calculado usando la hipótesis de Boussinesq [15], que se ve a continuación:

Definición 2.4: Hipótesis de Boussinesq.

$$-\rho \overline{u_i' u_j'} = \mu_t \cdot \left(\frac{\partial u_i}{\partial x_j} + \frac{\partial u_j}{\partial x_i}\right) - \frac{2}{3} \cdot \left(\rho k + \mu_t \frac{\partial u_i}{\partial x_i}\right) \cdot \delta_{ij}$$
(2.4)

•	ρ: Densidad del gas	$[kg/m^3]$
•	$\overline{u'_l}$: Valor medio de la componente fluctuante de la velocidad en i	[m/s]
•	$\overline{u'_j}$: Valor medio de la componente fluctuante de la velocidad en j	[m/s]
•	u _i : Velocidad del gas en la coordenada i	[m/s]
•	u _j : Velocidad del gas en la coordenada j	[m/s]
•	x _i : Posición en la coordenada i	[m]
•	x _j : Posición en la coordenada j	[m]
•	μ_t : Viscosidad turbulenta	$[Pa \cdot s]$
•	k: Energía cinética por turbulencia	$[m^2/s^2]$
•	δ_{ij} : Delta de Kronecker	[adimensional]

Por componente fluctuante se refiere a que, en cierto intervalo de tiempo, la velocidad puede ser escriba como la suma de la componente media y la componente fluctuante $u_i = \overline{u_i} + u'_i$, esto se conoce como descomposición de Reynolds. Usando la descomposición de Reynolds en la ecuación de continuidad y en la de momentum, se llega a las expresiones (2.3.1) y (2.3.2). Por esta razón, estas ecuaciones también son conocidas como ecuaciones RANS (*Reynolds-averaged Navier-Stokes equations*). De estas ecuaciones, no es posible eliminar el término $-\rho \overline{u'_i u'_j}$ que representa el efecto de la fluctuación de velocidad. Para resolver este término entonces se recurre a la hipótesis de Boussinesq (también conocida como *Boussinesq eddy viscosity assumption*).

Respecto a la ecuación de energía (2.3.3), el número de Prandtl turbulento es una magnitud adimensional que está acotada a un rango entre 0.7 y 0.9, siendo en el promedio de los casos igual a 0.85, que es el valor que se usa por defecto en herramientas CFD. El tensor de esfuerzos τ_{ij} por su parte representa el calentamiento por viscosidad que se produce cuando la energía que produce el cizalle entre dos capaz adyacentes de fluido se convierte en calor. Este es un fenómeno es común en toda clase de fluidos viscosos, y es representado por medio de la siguiente fórmula:

Definición 2.5: Tensor de esfuerzos.

$$\tau_{ij} = \mu_{eff} \cdot \left(\frac{\partial u_i}{\partial x_j} + \frac{\partial u_j}{\partial x_i}\right) - \frac{2}{3} \cdot \mu_{eff} \cdot \frac{\partial u_i}{\partial x_i} \cdot \delta_{ij}$$
(2.5)

•	τ_{ij} :	Tensor de esfuerzos	[<i>Pa</i>]
•	u _i :	Velocidad del gas en la coordenada i	[m/s]
•	и _ј :	Velocidad del gas en la coordenada j	[m/s]
•	x_i :	Posición en la coordenada i	[m]
•	x_j :	Posición en la coordenada j	[m]
•	μ_{eff}	:Viscosidad efectiva del gas	$[Pa \cdot s]$
•	δ_{ij} :	Delta de Kronecker	[adimensional]

La viscosidad efectiva del gas no es más que el efecto combinado de la viscosidad nominal del gas (también llamada viscosidad molecular) y la viscosidad turbulenta. La combinación de estos efectos se representa por medio de la siguiente fórmula:

Definición 2.6: Viscosidad turbulenta y viscosidad efectiva del gas

$$\mu_t = \rho C_\mu \frac{k^2}{\varepsilon} \tag{2.6.1}$$

$$\mu_{eff} = \mu + \frac{\mu_t}{\sigma} \tag{2.6.2}$$

•	μ_{eff} :Viscosidad efectiva del gas		$[Pa \cdot s]$	
•	μ:	Viscosidad nominal del gas	$[Pa \cdot s]$	
•	σ:	Constante propia de cada ecuación	[adimensional]	
•	C_{μ} :	Constante de viscosidad del modelo (=0.09)	[adimensional]	
•	k:	Energía cinética turbulenta	$[m^2/s^2]$	
•	<i>E</i> :	Tasa de disipación de la energía turbulenta	$[m^2/s^3]$	

El término σ cambia según en qué ecuación se utilice, así entonces, para la ecuación de energía interna se tiene $\sigma_T = 1$, para la energía cinética turbulenta $\sigma_k = 1$ y para la ecuación de la tasa de disipación de energía $\sigma_{\varepsilon} = 1.3$. Esto siempre referido al modelo $k - \varepsilon$. Los otros modelos $k - \varepsilon$ utilizan otras ecuaciones para calcular la viscosidad efectiva. En cuanto a la constante C_{μ} , ésta es igual a 0.09 para el modelo estándar. El número de Schmidt Sc es el cuociente entre la difusión viscosa y la difusión de masa, y por defecto las herramientas CFD usan el valor 0.7. Con respecto a la ecuación de energía cinética turbulenta (2.3.4), el término G_k se refiere a la generación de turbulencia y se calcula como:

Definición 2.7: Generación de energía cinética turbulenta.

$$G_k = \mu_t S^2 \tag{2.7.1}$$

$$S = \sqrt{2S_{ij}S_{ij}} \tag{2.7.2}$$

$$S_{ij} = \frac{1}{2} \left(\frac{\partial u_i}{\partial x_j} + \frac{\partial u_j}{\partial x_i} \right)$$
(2.7.3)

•	G_k :	Generación de energía cinética turbulenta	[<i>Pa/s</i>]
•	μ_t :	Viscosidad turbulenta del gas	$[Pa \cdot s]$
•	S_{ii} :	Tensor de la tasa de deformación	[1/s]

El término G_b en tanto se refiere al efecto de la gravedad sobre el flujo. Para el análisis del proceso de Cold Spray es válido asumir que el efecto de la gravedad es despreciable en primer lugar porque la posición de la tobera es variable durante el proceso y por tanto no es un parámetro de diseño, ello quiere decir que la gravedad puede apuntar en cualquier dirección, y en segundo lugar, la aceleración gravitación es equivalente a menos de la millonésima parte de la aceleración que experimenta el gas y las partículas de metal por acción de otras fuerzas. Por consiguiente se asume que este término es cero para efectos de este trabajo.

El término Y_M es el efecto de la compresibilidad en turbulencia, o dicho de otro modo, es el efecto de la variación de la velocidad del sonido en el flujo turbulento. Este efecto se calcula como:

Definición 2.8: Efecto de la compresibilidad o variación de la velocidad del sonido.

$$Y_M = \frac{2\rho\varepsilon\cdot k}{\gamma R\cdot T} \tag{2.8}$$

•	γ:	Constante de expansión adiabática del gas	[adimensional]
•	<i>R:</i>	Constante de gas ideal del gas	$[J/kg \cdot K]$
•	<i>T</i> :	Temperatura del gas	[K]
•	ρ:	Densidad del gas	$[kg/m^3]$
•	<i>k:</i>	Energía cinética por turbulencia	$[m^2/s^2]$
•	Е:	Tasa de disipación de la energía turbulenta	$[m^2/s^3]$

Finalmente el término S_k es definido por el usuario en caso de existir otras fuentes que generen turbulencia. Este no es el caso así que se asume $S_k = 0$.

Respecto a la última ecuación de la tasa de disipación de energía turbulenta (2.3.5), como no hay otras fuentes que generen cambio en la tasa de disipación de la energía turbulenta, entonces se puede asumir $S_{\varepsilon} = 0$. Ahora solo queda definir las constantes del modelo. La constante $C_{3\varepsilon}$ depende de las características del problema, pero como este término se multiplica a G_b que es asumido como cero, pues la aceleración de gravedad es despreciable para este problema, entonces naturalmente la constante $C_{3\varepsilon}$ también es irrelevante para este problema. Las demás constantes que definen al modelo $k - \varepsilon$ estándar se muestran a continuación en la <u>Tabla 2.1</u>:

$C_{1\varepsilon}$	$C_{2\varepsilon}$	σ_k	$\sigma_{arepsilon}$	C_{μ}
1.44	1.92	1.0	1.3	0.09

Tabla 2.1: Constantes del modelo k-epsilon estándar

{Tabla elaborada con datos de [14]}

Teniendo los valores de estas constantes ya es suficiente para plantear todas las ecuaciones del modelo $k - \varepsilon$ estándar. El siguiente paso es ver cómo es la resolución numérica de estas ecuaciones para poder caracterizar el flujo del gas de trabajo.

2.2 Método numérico de resolución

Como se observa en la parte anterior, las ecuaciones del modelo $k - \varepsilon$ están acopladas, ello quiere decir que comparten varias variables, por lo tanto la resolución numérica no es trivial. A continuación se explica a grandes rasgos el método de resolución.

Para la resolución de las ecuaciones se emplea el método de resolución conocido como *Density-based solver*. Al escoger esta opción, el esquema de resolución del problema es el siguiente, como se muestra en la Figura 2.1, extraída de [16]:



Figura 2.1: Esquema del Density-based Solver

{Figura extraída de [16]}

En este caso, primero se resuelven las ecuaciones RANS de continuidad (masa), de momentum y de energía. El siguiente paso entonces es resolver las ecuaciones con magnitudes escalares asociadas a turbulencia, que para el caso de los modelos $k - \varepsilon$ naturalmente son las variables k y ε . Una vez resueltas se verifica si se cumple el criterio de convergencia. De no ser así, se actualizan las propiedades del fluido y se vuelve a iterar.

El esquema es bastante simple pero para la resolución de las ecuaciones no es trivial. Las ecuaciones que gobiernan al sistema son no-lineales, por lo tanto, son linealizadas para que puedan ser resueltas computacionalmente. En la linealización, las ecuaciones pueden ser definidas como implícitas o explícitas como se ve a continuación.

Por linealización implícita se refiere a que, para una variable dada, el valor desconocido para cada celda es computada usando una relación que incluya tanto valores existentes como desconocidos en la vecindad de la celda. Por esta razón, cada valor desconocido va a aparecer en más de una ecuación del sistema, y estas ecuaciones deben ser resueltas simultáneamente para dar con estos valores desconocidos.

Por linealización explícita se refiere a que, para una variable dada, el valor desconocido es computado usando una relación que incluya solo valores ya existentes. Por esta razón, cada valor desconocido va a aparecer solo en una ecuación del sistema y las ecuaciones para el valor desconocido de cada celda pueden ser resueltas una por una para dar con estos valores desconocidos.

Para este trabajo se escoge la linealización implícita. Ello significa que para la resolución del sistema implícito, se usa el método de Gauss-Seidel junto con un método AMG (*Algebraic Multigrid Method*) [16].

Respecto al esquema de discretización espacial, se escoge *Second-Order Upwind* tanto para el flujo como para las variables k y ε del modelo.

Respecto al gradiente, considerando el tipo de malla que es de celdas rectangulares (el problema es tratado en un plano bidimensional con un eje axisimétrico), se sigue la recomendación de la guía teórica [17] y se escoge el método *Least Squares Cell-Based*.
2.3 Tratamiento de Pared e Inicialización

Respecto al tratamiento de pared, se utiliza la opción *Standard Wall Functions*, que viene por defecto en programas CFD. Este modelo surge del trabajo de Launder y Spalding [18].

En primer lugar, se definen dos parámetros adimensionales del modelo:

Definición 2.9: Parámetros adimensionales y⁺, y^{*}

$$y^+ \equiv \frac{\rho u_\tau y}{\mu} \tag{2.9.1}$$

$$y^* \equiv \frac{\rho_P c_{\mu}^{1/4} k_P^{1/2} y_p}{\mu}$$
(2.9.2)

• <i>ρ</i> : Densida	d del gas en un punto de la malla	$[kg/m^3]$
• u_{τ} : Velocida	d de fricción	[m/s]
• y: Distanci	a entre un punto de la malla y la pared	[m]
• ρ_P : Densida	d del gas en el punto P	$[kg/m^3]$
• C_{μ} : Constant	e del modelo estándar k-ε (=0.09)	[adimensional]
• k _P : Energía	cinética turbulenta en el punto P	$[m^2/s^2]$
• <i>y_p: Distanci</i>	a desde el punto P a la pared	[m]
• μ: Viscosid	ad dinámica del gas	$[Pa \cdot s]$

Definición 2.10: Esfuerzo de corte y velocidad de fricción en flujo turbulento

$$\tau_w = \rho \cdot u_\tau^2 \tag{2.10.1}$$

$$u_{\tau} = C_{\mu}^{1/4} k_P^{1/2} \tag{2.10.2}$$

•	τ_w : Esfuerzo de corte (Shear stress)	[<i>Pa</i>]
•	ho: Densidad del gas en un punto de la malla	$[kg/m^3]$
•	$u_{ au}$: Velocidad de fricción	[m/s]
•	C_{μ} : Constante del modelo estándar k- ε (=0.09)	[adimensional]
•	k _P : Energía cinética turbulenta en el punto P	$[m^2/s^2]$

El punto P corresponde al centroide de la celda adyacente a la pared. Se hace la distinción entre "y" e "y_P" porque el cálculo de "y⁺" y "u_t" es irrelevante para este modelo. No obstante, es importante mencionar que la ley logarítmica solo es válida cuando y⁺ > 30.

Los modelos de ley logarítmica y flujo laminar son usados para determinar el perfil de velocidades en proximidades de la pared, por tanto son modelos que vienen a definir las condiciones de borde de la ecuación de momentum.

Las ecuaciones que definen a la ley de pared logarítmica o ley de velocidad media (*law-of-the-wall mean velocity yields*) son las siguientes:

Definición 2.11: Ecuaciones de la ley de pared logarítmica

$$U^* = \frac{1}{\kappa} \ln(Ey^*)$$
 (2.11.1)

$$U^* = \frac{U_P C_{\mu}^{1/4} k_P^{1/2}}{\tau_{w/\rho}}$$
(2.11.2)

• <i>K:</i> Constante de von Karman (=0.4187)	[aaimensionai]
• <i>E</i> : <i>Constante del tratamiento de pared</i> (=9.793)	[adimensional]
• <i>U_P:Velocidad media del gas en el punto P</i>	[m/s]
• C_{μ} :Constante del modelo k- ε estándar (=0.09)	[adimensional]
• k _P :Energía cinética turbulenta en el punto P	$[m^2/s^2]$
• τ_w : Esfuerzo de corte (Shear stress)	[<i>Pa</i>]
 ρ: Densidad del gas 	$[kg/m^3]$

Este modelo es válido cuando se cumple que $y^* > 11,225$ ($\approx 11,2$). Notar que y^* es directamente proporcional a la distancia y_p . Esto viene a decir que y^* es un valor adimensional que refleja cuán lejos está un punto respecto a la pared, y con ello se determina si es válido el modelo de ley logarítmica o en su defecto hay que asumir flujo laminar.

Para el caso $y^* < 11,225$ ($\approx 11,2$), se asume flujo laminar. En este caso, la fórmula (2.11.1) ya no es válida, y en su lugar se asume $U^* = y^*$. La explicación se muestra a continuación.

■ En un flujo laminar, por definición se tiene que:

$$\tau_{w_{laminar}} \equiv \mu \frac{u_P}{y_P} \tag{2.12.1}$$

■ Reemplazando (2.12.1) en (2.11.2), notando que $u_P = U_P$ pues en un flujo laminar la velocidad media es igual a la velocidad instantánea, y recordando (2.9.2), se tiene:

$$U^{*} = \frac{\rho \cdot U_{P} C_{\mu}^{1/4} k_{P}^{1/2} y_{P}}{\mu \cdot u_{P}}$$

$$U^* = \frac{\rho \cdot C_{\mu}^{1/4} k_P^{1/2} y_P}{\mu}$$

$$U^* = y^* \tag{2.12.2}$$

٠	U*:Velocidad adimensional de la ley de pared	[adimensional]
•	ρ: Densidad del gas	$[kg/m^3]$
•	U _P :Velocidad media del gas en el punto P	[m/s]
٠	C_{μ} :Constante del modelo k- ε estándar (=0.09)	[adimensional]
•	k _P :Energía cinética turbulenta en el punto P	[m/s]
•	y _P :Distancia desde el punto P a la pared	[m]
•	μ: Viscosidad dinámica del gas	$[Pa \cdot s]$
•	u _P :Velocidad instantánea en el punto P	[m/s]
٠	y [*] Distancia adimensional de la ley de pared	[adimensional]

Para régimen laminar, la velocidad de fricción se calcula como $u_{\tau} = \sqrt{\tau_{w_{laminar}}/\rho}$. Aunque esta velocidad es irrelevante para este modelo de tratamiento de pared.

Con estas ecuaciones ya es suficiente para definir la velocidad en puntos adyacentes a la pared, y así definir las condiciones de borde de la ecuación de momentum.

Respecto a las condiciones de borde de la ecuación de energía, se necesita definir la temperatura en los puntos adyacentes a la pared. El modelo *Standard Wall Functions* puede obtener esta temperatura cuando existe un flujo de calor en la pared que es condición de borde [19]. Pero cuando ese no es el caso y la pared es adiabática, este modelo ya no es válido. Para un mejor entendimiento del modelo *Standard Wall Functions*, también es recomendable consultar los *papers* [20] y [21].

Los apuntes teóricos de programas CFD no suelen hacer mención del modelo utilizado para pared adiabática, pero se puede consultar el apunte teórico de Ansys-CFX [22], desde el cual se infiere que para un flujo a baja velocidad, la temperatura adyacente a la pared puede ser igual a la temperatura de pared, mientras que para un flujo a alta velocidad (Ma > 3), la temperatura en la celda adyacente a una pared adiabática se puede calcular como:

Definición 2.13: *Temperatura de punto adyacente a pared adiabática*

$$T_P = T_W - \frac{Pr_t U^2}{2 \cdot C_p}$$
(2.13)

•	T _P : Temperatura del gas en el punto P	[K]
•	T _w : Temperatura de pared	[K]
•	Pr _t :Número de Prandtl turbulento	[adimensional]
•	U: Velocidad del gas en el punto P	[m/s]
•	C_p : Calor específico del gas	$[J/kg \cdot K]$

Aunque no se señala cómo obtener la temperatura de pared, es sabido que esta temperatura es calculable si se conoce el tipo de régimen del flujo, como muestra el trabajo de Lieberman [23].

Para este trabajo de título, se asume que las paredes de las microtoberas son adiabáticas.

Retomando el modelo *Standard Wall Functions*, queda definir las condiciones de borde para las variables k y ε del modelo de turbulencia. En cuanto a esta primera variable, la condición de borde para un punto adyacente a la pared es la siguiente:

Definición 2.14: Condición de borde para la variable k

$$\frac{\partial k}{\partial n} = 0 \tag{2.14}$$

- $[m^2/s^2]$ k: Variable k del modelo $k - \varepsilon$ [m]
- n: Coordenada normal a la pared

Para resolver la condición de borde de la ecuación de energía cinética turbulenta, también se hace necesario definir una condición de borde para el parámetro G_k .

Definición 2.15: *Condición de borde para parámetro G_k*

$$G_k \approx \tau_w \frac{\partial U}{\partial y} = \tau_w \frac{\tau_w}{\kappa \rho c_\mu^{1/4} k_P^{1/2} y_P}$$
(2.15)

[<i>Pa</i>]
[m/s]
[m]
[adimensional]
$[kg/m^3]$
[adimensional]
$[m^2/s^2]$
[m]

Nótese que hasta este punto, no se ha definido explícitamente el valor k_P en el punto adyacente a la pared. Lo que se tiene es la ecuación de energía cinética turbulenta, que evaluada en el punto P, queda definida en términos de k_P y ε_P .

Lo que queda ahora es definir ε_P en términos de k_P . Esto permite computar el valor de estas variables de tal forma que sean concordantes con las condiciones de borde definidas.

Definición 2.16: Condición de borde ε_P definida en términos de k_P

$$\varepsilon_P = \frac{C_{\mu}^{3/4} k_P^{3/2}}{\kappa y_P}$$
(2.16)

•	ε_P : Tasa de disipación en el punto P	$[m^2/s^3]$
•	C_{μ} : Constante del modelo $k - \varepsilon$	[adimensional]
•	k _P : Energía cinética turbulenta en P	$[m^2/s^2]$
•	к: Constante de von Kármán (=0.4187)	[adimensional]
•	y _P : Distancia de la pared al punto P	[m]

Con esto ya se tienen todas las ecuaciones necesarias para computar k_P y ε_P , para así obtener todas las condiciones de borde necesarias para el modelo. Las condiciones de borde a la entrada de la tobera y a la salida del volumen de control son definidas por el usuario como se ve en la parte de metodología del presente informe.

Finalmente queda definir las condiciones iniciales en el volumen de control. En este caso la conviene utilizar la inicialización híbrida (*Hybrid Initialization*). Lo que hace es resolver la ecuación de Laplace a partir de las condiciones de borde [24]. No conviene utilizar otro tipo de inicialización, pues esto puede desencadenar un error en la simulación.

Ya se cuenta con las ecuaciones necesarias, con condiciones de borde, condiciones iniciales y un método numérico, por lo que están todas las condiciones necesarias para la resolución del problema. Al menos en lo que respecta al modelamiento del flujo de gas.

Las softwares comerciales e incluso las versiones de libre disposición (*open-sources*) suelen tener incorporados todas las ecuaciones y métodos números presentados en este capítulo, por lo que no hay necesidad de programarlos directamente. Sin embargo, es importante que el usuario entienda con cierta profundidad los algoritmos utilizados para un mejor entendimiento del problema que desea resolver y las dificultades que se pueden presentar.

Existen muchos softwares de modelamiento CFD que pueden resolver este tipo de problemas. El software en particular utilizado en este trabajo se menciona en el <u>Capítulo 3</u> de Metodología del presente informe.

2.4 Modelo de Arrastre de Partículas

Como se ya ha sido mencionado en el presente informe, para el desarrollo de este trabajo se ha asumido que el modelo del flujo de gas compresible y el modelo del arrastre de las partículas se pueden trabajar de forma desacoplada.

Primero se modela el flujo de gas y luego se utiliza esa solución para modelar la velocidad y temperatura de impacto de las partículas metálicas. Para lograr esto se debe definir un modelo de arrastre de partículas. En este caso se escoge la Aproximación de Henderson [25] que en softwares comerciales aparece con el nombre *high-Mach-number* o más específicamente *High-Mach-Number Drag Law* como aparece en la guía teórica [26].

Como norma general, para los modelos de arrastre, la partícula se desplaza de acuerdo a las siguientes ecuaciones:

Definición 2.17: Fuerzas actuando sobre la partícula

$$\frac{\partial u_p}{\partial t} = F_D \cdot \left(u - u_p\right) + g_x \cdot \frac{(\rho_p - \rho)}{\rho_p} + F_x \tag{2.17.1}$$

$$F_D = \frac{18\mu}{\rho_p D_p^2} \cdot \frac{c_D R e_p}{24}$$
(2.17.2)

$$Re_{p} = \frac{\rho D_{p} |u_{p} - u|}{\mu}$$
(2.17.3)

 <i>u_p</i>: Velocidad de la partícula 	[m/s]
• t: Tiempo	[<i>s</i>]
• <i>F_D: Fuerza de arrastre</i>	[1/s]
• u: Velocidad del gas	[m/s]
• g_x : Aceleración de gravedad en la dirección x	$[m/s^2]$
 <i>ρ_p</i>: Densidad de la partícula 	$[kg/m^3]$
 ρ: Densidad del gas 	$[kg/m^3]$
• <i>F_x</i> : <i>Fuerzas adicionales</i>	$[m/s^2]$
 μ: Viscosidad dinámica del gas 	$[Pa \cdot s]$
• <i>D_p: Diámetro de la partícula</i>	[m]
• C _D : Coeficiente de arrastre	[adimensional]
• Re _p :Número de Reynolds de la partícula	[adimensional]
24	

Para el caso de la ecuación (2.17.1), como se menciona previamente en este informe, la gravedad es despreciable, por lo que $g_x \approx 0$. Luego las fuerzas adicionales también son despreciables dado que la escala del modelo es muy grande. Solo cuando las partículas tienen un tamaño menor a 1 μm se pueden considerar otro tipo de fuerzas, como la fuerza Browniana por ejemplo. Como este no es el caso, se asume $F_x \approx 0$. Con respecto a la ecuación (2.17.2), ésta es válida solo cuando las partículas son esféricas, o similares a esferas si es que el modelo cuenta con algún factor de corrección.

En lo que se diferencia un modelo de otro es en el coeficiente de arrastre C_D . La aproximación de Henderson calcula este valor definiendo dos regímenes diferentes, uno subsónico y otro supersónico, además de un tercer régimen intermedio.

Definición 2.18: Coeficiente de arrastre en régimen subsónico y supersónico

Régimen subsónico ($M_{\infty} \leq 1$):

$$C_{D} = 24 \left[Re_{p} + M_{p} \sqrt{\frac{\gamma}{2}} \left\{ 4.33 + \left(\frac{3.65 - 1.53 \frac{T_{w}}{T}}{1 + 0.353 \frac{T_{w}}{T}} \right) \cdot \exp(-0.247 \frac{Re_{p}}{M_{p}} \sqrt{\frac{2}{\gamma}} \right\} \right]^{-1} + \exp\left(-\frac{0.5M_{p}}{\sqrt{Re_{p}}} \right) \left[\frac{4.5 + 0.38(0.03 Re_{p} + 0.48 \sqrt{Re_{p}})}{1 + 0.03 Re_{p} + 0.48 \sqrt{Re_{p}}} + 0.1 M_{p}^{-2} + 0.2 M_{p}^{-8} \right] + 0.6 M_{p} \sqrt{\frac{\gamma}{2}} \left[1 - \exp\left(-\frac{M_{p}}{Re_{p}} \right) \right]$$
(2.18.1)

Régimen supersónico ($M_{\infty} \ge 1.75$):

$$C_{D} = \frac{0.9 + \frac{0.34}{M_{\infty}^{2}} + \left(\frac{M_{\infty}}{Re_{\infty}}\right)^{1/2} \left[2 + \frac{2}{M_{\infty}^{2}} \cdot \frac{2}{\gamma} + \frac{1.058}{M_{\infty}} \sqrt{\frac{2}{\gamma}} \left(\frac{T_{W}}{T}\right)^{1/2} - \frac{1}{M_{\infty}^{4}} \cdot \left(\frac{2}{\gamma}\right)^{2}\right]}{1 + 1.86 \left(\frac{M_{\infty}}{Re_{\infty}}\right)^{1/2}}$$
(2.18.2)

- *C_D*: *Coeficiente de arrastre*
- M_{∞} : Número de Mach del gas
- Re_{∞} :Número de Reynolds de la partícula
- M_p: Número de Mach relativo
- Re_v: Número de Reynolds de la partícula
- γ: Coeficiente de expansión adiabática
- *T_w*: *Temperatura de partícula (asumida uniforme)*
- T: Temperatura del gas en flujo libre

[adimensional] [adimensional] [adimensional] [adimensional] [adimensional] [K] [K] Por número de Mach relativo M_p se refiere al número de Mach calculado a partir de la velocidad relativa. Es decir, la diferencia entre la velocidad del gas y la velocidad de la partícula.

Aún queda por evaluar el régimen para número de Mach M_{∞} entre 1 y 1.75, el cual podría ser llamado régimen "transónico". La forma en que Henderson resuelve este problema es simplemente haciendo una interpolación lineal entre los valores ya conocidos del coeficiente de arrastre para número de Mach igual a 1 y 1.75.

Definición 2.19: Coeficiente de arrastre para régimen transónico

$$C_D(M_{\infty}, Re_{\infty}) = C_D(1, Re_p) + \frac{4}{3}(M_{\infty} - 1)[C_D(1.75, Re_{\infty}) - C_D(1, Re_p)]$$
(2.19)

C_D: Coeficiente de arrastre [adimensional]
M_∞: Número de Mach del gas [adimensional]
Re_∞:Número de Reynolds de la partícula [adimensional]
M_p: Número de Mach relativo [adimensional]
Re_p: Número de Reynolds de la partícula [adimensional]

Por $C_D(1, Re_p)$ se refiere al coeficiente de arrastre cuando $M_{\infty} = 1$, y $C_D(1.75, Re_{\infty})$ al coeficiente de arrastre cuando $M_{\infty} = 1.75$. En tanto que $C_D(M_{\infty}, Re_{\infty})$ es el coeficiente de arrastre para un número de Mach M_{∞} comprendido entre esos valores.

Definido el coeficiente de arrastre ya se puede calcular la fuerza de arrastre y con ello la aceleración de la partícula. Para modelar la trayectoria y velocidad de la partícula, simplemente se utiliza integración numérica sobre la ecuación de movimiento de la partícula (2.17.1) para condiciones iniciales definidas por el usuario.

2.5 Modelo de Intercambio de Calor de la Partícula

Asumiendo que la temperatura de la partícula es uniforme, el intercambio de calor de la partícula está definido por las siguientes ecuaciones:

Definición 2.20: Ecuaciones intercambio de calor de la partícula

$$m_p c_p \frac{dT_p}{dt} = h A_p \left(T_{\infty} - T_p \right) + \varepsilon_p A_p \sigma \left(\theta_R^4 - T_p^4 \right)$$
(2.20.1)

$$\theta_R^4 = \frac{1}{4\sigma} \cdot \int_{\Omega = 4\pi} I \, d\Omega \tag{2.20.2}$$

$$Nu = \frac{hD_p}{\lambda_{\infty}} = 2.0 + 0.6 \cdot Re_p^{1/2} \cdot Pr^{1/3}$$
(2.20.3)

 <i>m_p:Masa de la partícula</i> 	[kg]
• <i>c_p: Calor específico de la partícula</i>	$[J/kg \cdot K]$
• T _p : Temperatura de la partícula	[K]
• T_{∞} : Temperatura del fluido	[K]
• t: Tiempo	[<i>s</i>]
h: Coeficiente de convección	$[W/m^2K]$
• A _p : Superficie de la partícula	$[m^2]$
 ε_p: Emisividad de la partícula 	[adimensional]
• <i>σ</i> : <i>Constante de Stefan-Boltzmann</i>	$[W/m^2K^4]$
$(=5.67 \cdot 10^{-8} W/m^2 K^4)$	
• θ_R : Temperatura de radiación	[K]
I: Intensidad de radiación	$[W/m^2]$
 Ω: Ángulo sólido 	[adimensional]
Nu: Número de Nusselt	[adimensional]
 D_p: Diámetro de la partícula 	[m]
• λ_{∞} : Conductividad térmica del gas	$[W/m \cdot K]$
 Re_p:Número de Reynolds de la partícula 	[adimensional]
Pr: Número de Prandtl	[adimensional]

La primera ecuación (2.20.1) es la ecuación de intercambio de calor de la partícula. La segunda ecuación (2.20.2) expresa la integral necesaria para calcular la radiación incidente sobre la partícula, que se expresa como el término temperatura de radiación θ_R . La última ecuación (2.20.3) permite relacionar el número de Nusselt con el coeficiente de convección. Esta fórmula del número de Nusselt es conocida como la correlación de Ranz y Marshall [27].

Como se observa en las ecuaciones anteriores, el efecto del intercambio térmico por radiación puede ser incluido. Sin embargo, esto tiene un costo computacional mayor y su efecto es irrelevante para efectos de este trabajo. Considerando que la transferencia de calor entre la partícula y el medio (gas de trabajo) se produce principalmente por convección, entonces no es necesario considerar la radiación, ni definir la emisividad de la partícula, que es variable del modelo.

En caso que se quisiese incluir el efecto de la radiación, en la ventana de diálogo del modelo de radiación (*Radiation Model Dialogue Box*) se puede activar la opción P1. Aunque se repite, ese no es el caso para efectos de este trabajo.

Para resumir, de la ecuación (2.17.2) del modelo de arrastre de partículas, se tiene que un dato necesario es la densidad de la partícula. De la ecuación (2.20.1) se tiene que también es necesario conocer el calor específico de la partícula. Ambos datos son definidos por el usuario y pueden ser asumidos como constantes.

Con respecto al gas de trabajo, el usuario debe definir calor específico, conductividad térmica y viscosidad. En este caso, las propiedades no pueden ser asumidas como constantes, sino que deben ser tratadas en función de la temperatura como se describe en la parte de metodología.

A partir de este punto ya se tienen todos los antecedentes necesarios para obtener la velocidad y temperatura de impacto para una única partícula.

2.6 Modelo Estocástico

Las partículas se mueven a través de un flujo turbulento, cuyo campo de velocidades presenta variaciones aleatorias, es decir, la turbulencia como tal es un fenómeno no determinista.

Para incluir esta aleatoriedad que afecta en la velocidad de la partícula, se decide utilizar el modelo comocido como DRW (*Discrete Random Walk Model*) [28].

El campo de velocidades obtenido de los modelos anteriores es esencialmente un campo de velocidades medias. Para incluir la componente fluctuante (recordar la descomposición de Reynolds [29]), el modelo DRW toma algunas aproximaciones para el caso de los modelos $k - \varepsilon$.

La primera aproximación es para determinar la velocidad fluctuante. Aunque existe el modelo RSM (*Reynolds Stress Model*) para trabajar con sistemas anisótropos, para este trabajo se asume que el campo de velocidad fluctuante es isótropo, en cuyo caso, la velocidad fluctuante local se estima de la siguiente manera:

Definición 2.21: Calculo de la velocidad fluctuante instantánea

Fórmula válida tanto para la coordenada i como para la coordenada j

$$u' = \xi \sqrt{\frac{2k}{3}} \tag{2.21}$$

•	u': Velocidad fluctuante instantánea	[m/s]
•	ξ : Valor aleatorio distribuido normalmente	[adimensional]
•	k: Energía cinética turbulenta	$[m^2/s^2]$

El tiempo de vida característico de estas fluctuaciones (*Characteristic lifetime of the eddy*) puede ser asumido constante por simplicidad, o aleatorio para tener una representación más realista del modelo estocástico. Ambas formas de calcular este tiempo se muestran a continuación:

Opción constante

$$\tau_e = 2 \cdot C_L \frac{k}{\varepsilon} \tag{2.22.1}$$

Opción aleatoria

$$\tau_e = -C_L \frac{k}{\varepsilon} \cdot \ln(r) \tag{2.22.2}$$

•	τ_e : Characteristic lifetime of eddy	[<i>s</i>]
•	C_L : Constante definida por el usuario	[adimensional]
•	k: Energía cinética turbulenta	$[m^2/s^2]$
•	ε: Tasa de disipación de energía turbulenta	$[m^2/s^3]$
•	r: Valor aleatorio entre 0 y 1 distribuido uniformemente	[adimensional]

La constante C_L es definida por el usuario pero se recomienda mantener el valor por defecto que es $C_L = 0.15$ para modelos $k - \varepsilon$.

La opción aleatoria aparece en softwares comerciales aparece con el nombre *Random Eddy Lifetime*. Es importante mencionar que los resultados son similares para ambas opciones y no hay una diferencia significativa en cuanto al "gasto computacional" entre ellas.

Otro parámetro que debe ajustar el usuario es el Número de Intentos. Al hacer varios intentos, es decir, varios "lanzamientos" de una misma partícula, la partícula va a atravesar campos de velocidades diferentes (definidos aleatoriamente) lo que permite detectar el efecto de la turbulencia en la variación de los resultados para una misma condición de operación.

El obtener una distribución de velocidades y temperaturas diferentes, aun cuando las condiciones del medio se mantienen constantes, de alguna manera se asemeja a lo que se obtiene en ensayos experimentales reales, donde se tiene una distribución de velocidades significativa a pesar de que las condiciones de operación se mantienen constantes. Por esta razón, es importante para la representación del problema incluir un modelo estocástico.

Recordando la descomposición de Reynolds $u = \bar{u} + u'$, con el campo de velocidades medias y las velocidades fluctuantes, se obtiene la velocidad instantánea del gas en cada punto que atraviesa la partícula. Como la velocidad del gas varía, naturalmente varía la aceleración por arrastre de la partícula y el coeficiente de convección. Es decir, la velocidad y temperatura de la partícula se verán modificadas como consecuencia del modelo estocástico.

Capítulo 3

Metodología

3.1 Evaluación de los objetivos del trabajo

A continuación se presenta un repaso de cada uno de los objetivos específicos de este trabajo (mencionados previamente en la <u>Sección 1.3</u> del presente informe), explicando con mayor detalle los modelos y referencias necesarias para el cumplimiento de cada uno de ellos.

Objetivos específicos:

- Validar un conjunto de modelos pre-existentes utilizados por Alexey Sova en su paper "Deposition of Aluminum Powder by Cold Spray Micronozzle" [9] para calcular la velocidad y temperatura de las partículas de Cobre justo antes de impactar con el sustrato. El trabajo de Alexey Sova ha sido probado exitosamente con partículas de Aluminio y con Helio puro como gas de trabajo, y utiliza el modelo k – ε estándar, la aproximación de Henderson y el modelo estocástico Discrete Random Walk para este propósito.
- Definir numéricamente las propiedades termodinámicas de mezclas Helio-Nitrógeno en función únicamente de la temperatura. Asumiendo expansión isentrópica del gas de trabajo dentro de la tobera para así también calcular la presión del gas en función de la temperatura.
- Seleccionar ocho configuraciones diferentes de microtobera maximizando la velocidad de salida del gas de trabajo bajo condiciones de tobera ideal unidimensional e isentrópica.
- Modelar el flujo de gas con el modelo ya validado (<u>Modelo k ε estándar</u>), modificando únicamente las propiedades del gas trabajo, pasando de usar Helio puro a incorporar las propiedades termodinámicas de mezclas Helio-Nitrógeno ya previamente definidas.

- Modelar el arrastre de las partículas por acción del gas de trabajo utilizando los modelos ya validados (<u>Aproximación de Henderson</u> y <u>Discrete Random Walk</u>), y modificando únicamente el material de las partículas, pasando de usar Aluminio a utilizar partículas de Cobre con diámetros que varían entre 5 μm y 45 μm.
- Estimar la <u>eficiencia de depósito</u>, es decir, el cociente másico entre las partículas que efectivamente se adhieren a la superficie de trabajo versus el total de partículas proyectadas, de acuerdo a la expresión (1.2). Para ello se determina a partir de qué tamaño de partícula (diámetro) aún se tiene adhesión entre la partícula y la superficie de trabajo. Luego, se considera que todas las partículas de menor tamaño se adhieren a la superficie, mientras que las partículas de mayor tamaño no lo hacen. El criterio para considerar que una partícula se ha adherido a la superficie de trabajo es el de <u>velocidad crítica</u> descrito por Hamid Assadi y otros autores en su trabajo "*On parameter selection in Cold Spraying*" [10]. La velocidad crítica para el caso del Cobre está representada por la expresión (1.1).

A partir de este punto queda claro que para el desarrollo de este trabajo es imprescindible el uso de tres modelos en particular, el <u>modelo $k - \varepsilon$ estándar</u>, la <u>aproximación de Henderson</u> y el modelo estocástico <u>Discrete Random Walk</u>. También se hace uso frecuente de dos conceptos claves, la <u>velocidad crítica</u>, que sirve para identificar qué partículas se adhieren a la superficie de trabajo, y la <u>eficiencia de depósito</u>, que se calcula utilizando esta velocidad crítica.

La eficiencia de depósito permite evaluar de alguna manera cuán eficiente es el proceso en sí y cuánto es el desperdicio de polvo metálico. Aspecto que puede ser incluído en el análisis de costos operacionales de las microtoberas, aunque esto escapa a los alcances de este trabajo. La razón para calcular la eficiencia de depósito es simplemente para tener una referencia y para determinar cuáles microtoberas tendrán un mejor desempeño en un futuro ensayo experimental.

El propósito de este trabajo no es seleccionar la mejor microtobera, pero sí proveer de datos necesarios para que en un futuro trabajo se haga este análisis. En términos generales, se considera que un proceso de *Cold Spray* <u>es factible si la eficiencia de depósito es de al menos un 35-40%</u>, aunque este criterio puede variar según los requerimientos del usuario. Por esta razón, la eficiencia de depósito también sirve para determinar si las microtoberas son capaces de proveer resultados satisfactorios para considerar su contrucción y testeo en laboratorio.

3.2 Pruebas iniciales sin modelo estocástico

El desarrollo de este trabajo está basado principalmente en el empleo de las herramientas computacionales <u>Ansys FLUENT</u>, para el modelamiento fluido-dinámico, y <u>Matlab</u>, para la selección de parámetros y el procesamiento de datos. La idea entonces es iniciar con un modelo simple que permita practicar el manejo de estos programas y evaluar si los resultados son exitosos para luego optar a modelos más complejos.

Particularmente, el empleo de un modelo estocástico dificulta considerablemente el procesamiento de datos. Esto básicamente por la gran cantidad de datos que se generan. Por esta razón, para realizar las primeras pruebas con Ansys FLUENT, se escoge un trabajo de modelamiento fluido-dinámico con *Cold Spray* que no incluye modelo estocástico. El trabajo seleccionado es "*Velocity of the particles accelerated by a cold spray micronozzle: Experimental measurements and numerical simulation*" de Alexey Sova [12].

Este trabajo utiliza el modelo de turbulencia Spalart-Allmaras [30], que cuenta con una ecuación menos que los modelos $k - \varepsilon$, lo que se traduce en menor tiempo computacional. Este modelo es incompatible con modelos estocásticos como DRW. En cuanto al arrastre de las partículas, se utiliza el modelo de Haider y Levenspiel [31], que en Ansys FLUENT aparece con el nombre de *Nonspherical Drag Law*. El detalle de estos modelos no se muestra en el presente informe por no ser de interés para la obtención de los resultados definitivos, pero las publicaciones científicas relacionadas quedan disponibles en la sección de Referencias ([30], [31]).

3.3 Modelo definitivo y Validación

Una vez realizadas las primeras pruebas con el programa Ansys FLUENT se procede a evaluar un trabajo que sí incluya modelo estocástico y que esté validado experimentalmente. El trabajo escogido para este efecto es "*Deposition of aluminum powder by cold spray micronozzle*", nuevamente de Alexey Sova [9].

Se prefieren los trabajos de este autor porque él cuenta con una microtobera construida con la que valida experimentalmente sus resultados. Esta microtobera es la más pequeña que existe en la actualidad, con un largo de 20 mm (sección divergente) y un diámetro de salida de 1 mm. El inconveniente de esta microtobera es que solo funciona con Helio puro y obtiene depositación de Cobre solo para bajo espesor. Además, su fabricación es muy compleja, puesto que el ángulo interno en la región divergente es de apenas 0.7° grados. Por todos estos inconvenientes es que en este trabajo de título se evalúan microtoberas más grandes. Una fotografía de la microtobera de Sova se muestra en la <u>Figura 3.1</u>.



Figura 3.1: Microtobera de Sova junto a moneda de 2 Euros

{Figura extraída de [11]}

Este paper de Sova utiliza el modelo $k - \varepsilon$ estándar, la aproximación de Henderson para el arrastre de las partículas y el modelo *Discrete Random Walk* como modelo estocástico. Todos estos modelos son explicados detalladamente en el Capítulo 2 de Modelos del presente informe.

El paper [9] muestra los resultados de velocidad y temperatura de impacto. Por <u>punto de</u> <u>impacto</u> se considera un punto a cierta distancia de la salida de la microtobera. Es decir, las partículas <u>no</u> impactan literalmente, ya que para el ensayo experimental no se usa un sustrato o superficie de trabajo de prueba. Es decir, no es objetivo del paper medir eficiencia de depósito ni el efecto del *Bow Shock*. Esta distancia no es especificada, pero la región en la que se mide la velocidad de las partículas está ubicada entre 1 y 6 mm desde la salida de la microtobera.

Las partículas son iluminadas con una fuente externa (lámpara). La luz es reflejada por las partículas y es captada por una cámara fotográfica cuyo tiempo de exposición es de 1 μ s. Las imágenes que se obtienen de esta cámara son líneas que representan la trayectoria de la partícula durante el microsegundo de exposición. De acuerdo al largo de estas líneas se puede determinar la velocidad media de la partícula en ese tramo. La Figura 3.2 extraída del paper [12] es un ejemplo del tipo de fotografías que se obtienen.



Figura 3.2: Ejemplo de fotografía y detección de trayectorias en partículas de Aluminio

{Figura extraída de [12]}

Para validar los modelos del paper [9] se evalúan dos aspectos. En primer lugar, se busca obtener velocidades y temperaturas de impacto similares a las obtenidas por Sova, con un error máximo admisible de un 15%. En total se evalúan nueve tamaños de partículas diferentes y se hacen 100 lanzamientos de partícula para cada caso. De esos 100 lanzamientos se calculan valores máximos, mínimos y promedios para cada caso.

A continuación, la <u>Figura 3.3</u> muestra los resultados del paper [9] en cuanto a velocidad y temperatura de impacto. La comparación entre estos valores y los resultados obtenidos de la validación se muestran en el Capítulo 4 de Resultados de este informe. Los <u>valores de los extremos</u> de la imagen corresponden a máximos y mínimos, mientras que los <u>valores en cuadrado</u> corresponden a valores promedios.



[{]Figura extraída de [9]}

El segundo aspecto que se evalúa es la <u>velocidad media</u> que alcanzan las partículas para una distribución de tamaño de partículas dada. En efecto, la <u>distribución del tamaño de partícula</u> en el polvo de Aluminio es conocida, por lo tanto, si la velocidad de impacto es conocida para cada tamaño de partícula, entonces es posible deducir cuál será la velocidad media del total de partículas que detecte la cámara. Este último punto es muy importante, la cámara no es capaz de detectar todas las partículas. De hecho, la cámara es incapaz de detectar partículas menores a 10 μm y posiblemente tiene dificultad para detectar partículas en torno a los 15 μm . Ello quiere decir que las partículas menos a 15 μm no pueden ser incluidas en el análisis. En el Capítulo 4 de Resultados de este informe se evalúa cuánto se acerca la velocidad media obtenida por la validación del paper respecto a la velocidad media efectivamente medida.

Si el error entre la velocidad calculada y la velocidad media medida es menor a un 10 %, entonces el paper y sus modelos se dan por validados. De hecho, en la sección de Resultados de este informe, se ve que este porcentaje de error resulta ser bastante menor.

3.4 Mezclas binarias Helio-Nitrógeno

Nótese que en los papers [9] y [12] de Alexey Sova, la microtobera siempre es utilizada con Helio puro. Aparentemente ni siquiera se considera Nitrógeno como una posibilidad, por la baja velocidad que éste alcanza, y menos el uso de mezclas Helio-Nitrógeno, pues añadir un sistema de premezcla de estos gases supone una complicación adicional al montaje experimental.

Ante esto, surge la pregunta acerca de cómo incorporar mezcla de gases en el modelo que se quiere implementar. Para modelar un gas, esencialmente se necesita conocer su <u>calor específico</u>, <u>viscosidad</u> y <u>conductividad térmica</u> como función de la temperatura, además del <u>peso molecular</u>.

Un punto de inicio es tener una base de datos de estas propiedades tanto para el Helio como para el Nitrógeno. La base de datos del Helio se obtiene del libro de la *National Bureau of Standards* de Estados Unidos [32]. Mientras que la base de datos del Nitrógeno se obtiene de la información en línea provista por *Peace Software* [33].

Una vez que se tienen estos datos, lo siguiente es determinar cómo varían las propiedades de la mezcla según la proporción con que se mezcla de cada gas primario. Para efectos de cálculo, por proporción se hace referencia a la <u>fracción molar</u> de cada gas.

Hay propiedades que pueden ser calculadas teóricamente, asumiendo que no hay reacción química entre los gases (recordar que el Helio es gas noble y el Nitrógeno es poco reactivo). Estas propiedades son el peso molecular y calor específico.

En cuanto al peso molecular, éste se calcula interpolando linealmente con respecto a la proporción de Helio y de Nitrógeno (fracciones molares):

Definición 3.1: Cálculo del peso molecular de una mezcla Helio-Nitrógeno

$$MW = x_{He} \cdot MW_{He} + x_{N_2} \cdot MW_{N_2} \tag{3.1}$$

•	MW:	Peso molecular de la mezcla	[kg/kmol]
•	MW_{He} :	Peso molecular del Helio	[kg/kmol]
•	MW_{N_2} :	Peso molecular del Nitrógeno	[kg/kmol]
•	x _{He} :	Fracción molar del Helio	[adimensional]
•	x_{N_2} :	Fracción molar del Nitrógeno	[adimensional]

En tanto, la densidad de una mezcla puede ser calculada a partir del peso molecular de la misma mezcla o bien, directamente a partir de las fracciones molares. Todo esto utilizando la ley de gas ideal, como se ve a continuación:

Definición 3.2: Ley de gas ideal para calcular la densidad de una mezcla Helio-Nitrógeno

$$\rho = \frac{P \cdot MW}{R \cdot T} \tag{3.2.1}$$

■ Reemplazando la expresión (3.1):

$$\rho = \frac{P}{R \cdot T} \cdot (x_{He} \cdot MW_{He} + x_{N_2} \cdot MW_{N_2})$$

$$\rho = x_{He} \cdot \rho_{He} + x_{N_2} \cdot \rho_{N_2} \tag{3.2.2}$$

MW: Peso molecular de la mezcla [kg/kmol] [kg/kmol] MW_{He} : Peso molecular del Helio • MW_{N_2} : Peso molecular del Nitrógeno [kg/kmol] Fracción molar del Helio [adimensional] x_{He} : Fracción molar del Nitrógeno [adimensional] x_{N_2} : • $[kg/m^3]$ ρ: Densidad de la mezcla • $[kg/m^3]$ Densidad del Helio ρ_{He} : $[kg/m^3]$ Densidad del Nitrógeno ρ_{N_2} : [Pa]*P*: Presión [K]T: Temperatura R: *Constante universal de gas ideal* $[J/kmol \cdot K]$ (=8314.4598 J/kmol-K)

El programa Ansys FLUENT tiene incorporada la expresión (3.2.1) para calcular densidad por medio de la opción *ideal-gas*. Nótese que es válido asumir que la mezcla de gases ideales también resulta en un gas ideal, como por ejemplo, es el supuesto que se toma para Aire.

En cuanto al calor específico, éste puede ser calculado nuevamente como una interpolación lineal, pero en este caso, se usan las fracciones másicas en lugar de las fracciones molares, como se muestra a continuación:

Definición 3.3: Cálculo del calor específico para una mezcla Helio-Nitrógeno

$$C_p = \frac{m_{He}}{m} \cdot C_{p_{He}} + \frac{m_{N_2}}{m} \cdot C_{p_{N_2}}$$

$$C_p = \frac{x_{He} \cdot MW_{He} \cdot C_{p_{He}} + x_{N_2} \cdot MW_{N_2} \cdot C_{p_{N_2}}}{x_{He} \cdot MW_{He} + x_{N_2} \cdot MW_{N_2}}$$
(3.3)

•	C_p :	Calor específico de la mezcla	[J/kgK]
•	$C_{p_{He}}$:	Calor específico del Helio	[J/kgK]
•	$C_{p_{N_2}}$:	Calor específico del Nitrógeno	[J/kgK]
•	MW:	Peso molecular de la mezcla	[kg/kmol]
•	MW_{He} :	Peso molecular del Helio	[kg/kmol]
•	MW_{N_2} :	Peso molecular del Nitrógeno	[kg/kmol]
•	x _{He} :	Fracción molar del Helio	[adimensional]
•	x_{N_2} :	Fracción molar del Nitrógeno	[adimensional]
•	<i>m:</i>	Masa de la mezcla	[kg]
•	m_{He} :	Masa del Helio	[kg]
•	m_{N_2} :	Masa del Nitrógeno	[kg]

El cálculo del peso molecular y el calor específico es relativamente sencillo. La dificultad aparece cuando no es posible deducir directamente cómo calcular la viscosidad y la conductividad térmica. Sin embargo, existen mediciones experimentales que permiten caracterizar las mezclas Helio-Nitrógeno, como muestra el trabajo de Tournier y El-Genk [34].

Este trabajo muestra que la viscosidad crece al aumentar la temperatura y que a bajas presiones la viscosidad varía linealmente de acuerdo a la fracción molar.

Definición 3.4: Cálculo de la viscosidad de una mezcla Helio-Nitrógeno

$$\mu = x_{He} \cdot \mu_{He} + x_{N_2} \cdot \mu_{N_2} \tag{3.4}$$

•	μ:	Viscosidad de la mezcla	$[Pa \cdot s]$
•	μ_{He} :	Viscosidad del Helio	$[Pa \cdot s]$
•	μ_{N_2} :	Viscosidad del Nitrógeno	$[Pa \cdot s]$
•	x _{He} :	Fracción molar del Helio	[adimensional]
•	x_{N_2} :	Fracción molar del Nitrógeno	[adimensional]

Si bien el trabajo de Tournier y El-Genk no propone la fórmula (3.4), y en su lugar propone expresiones que resultan más precisas, por simplicidad del modelo se asume linealidad para determinar la viscosidad en el caso de mezclas Helio-Nitrógeno. La <u>Figura 3.4</u> extraída de [34] muestra que este supuesto es válido.



Figura 3.4: Variación de la viscosidad de mezclas Helio-Nitrógeno a presión ambiente

{Figura extraída de [34]}

En el caso de presiones mayores, la linealidad en la variación de la viscosidad no se ve mayormente afectada (linealidad respecto a la fracción molar de los componentes de la mezcla). Además, se tiene un resultado muy interesante. Para condiciones en la salida de una microtobera regular (200 K y 0.06 MPa) la diferencia de valores en la viscosidad del Helio puro y del Nitrógeno puro es de alrededor de 17.15%, mientras que para condiciones de entrada a la microtobera (750 K y 3.5 MPa), la diferencia es de un 8.97%. Esto quiere decir que al aumentar la presión, disminuye la diferencia entre la viscosidad del Helio y la del Nitrógeno, y por lo tanto, si hay alguna pérdida de linealidad, su efecto se verá disminuido. Otra razón para no considerar la presión es simplemente porque el efecto de la presión es despreciable. Por ejemplo, evaluando a 750 K, en un rango entre 0.06 MPa y 3.5 MPa, la viscosidad del Helio varía un 0.11%, mientras que la del Nitrógeno varía 0.64% (Información calculada de los datos en [32] y [33]). Esto quiere decir que asumir que la viscosidad depende únicamente de la temperatura y no de la presión es un supuesto fuerte.

Utilizando este supuesto, aparece la Ley de Sutherland, que caracteriza la viscosidad como función únicamente de la temperatura, y utiliza como referencia una viscosidad conocida a una temperatura dada (además de una constante S que puede ser calculada a partir de un segundo dato auxiliar de viscosidad). La fórmula de la ley de Sutherland es la siguiente:

Definición 3.5: Ley de Sutherland para la viscosidad de gases ideales

$$\mu(T) = \mu_{ref} \left(\frac{T}{T_{ref}}\right)^{3/2} \cdot \frac{T_{ref} + S}{T + S}$$
(3.5)

•	$\mu(T)$: Viscosidad de la mezcla como función de la temperatura	$[Pa \cdot s]$
•	μ_{ref} : Viscosidad de referencia a la temperatura T_0	$[Pa \cdot s]$
•	T: Temperatura del gas	[K]
•	T _{ref} : Temperatura de referencia	[K]
•	S: Temperatura constante del modelo	[K]

Disponiendo de una base de datos para Helio y Nitrógeno, y de la fórmula (3.4) se puede llegar a calcular μ_{ref} y S para una temperatura T_{ref} arbitraria.

Finalmente, queda determinar cómo calcular la conductividad térmica para las mezclas Helio-Nitrógeno. Esta propiedad no puede ser tratada como una interpolación lineal entre las propiedades del Helio y del Nitrógeno, como muestra el mismo trabajo de Tournier y El-Genk [34].

En este caso se tiene que la conductividad térmica del Nitrógeno no varía demasiado al variar la presión. Por otra parte, la conductividad térmica del Helio sí depende significativamente de la presión. Sin embargo, la variación de la conductividad térmica del Helio a presiones menores a 5 MPa no es significativa (recordar que la presión máxima en las microtoberas es 3.5 MPa). De hecho, la variación máxima de la conductividad en ese rango de presiones es de alrededor de un 3%. Con este resultado nuevamente es posible desprenderse de la dependencia de la presión y caracterizar la conductividad térmica únicamente en términos de la temperatura. Para notar el efecto de la presión en mezclas Helio-Nitrógeno, se muestra la <u>Figura 3.5</u> extraída de [34].



Figura 3.5: Variación de la conductividad térmica en mezclas Helio-Nitrógeno

Para el estudio de las microtoberas, se trabaja únicamente con presiones menores a 3.5 MPa. Por esta razón, no se recurre a las fórmulas planteadas en el trabajo de Tournier y El-Genk. En su lugar, se opta por crear un modelo simplificado.

Primero se calcula un factor de ponderación f_{He} por medio de una interpolación de cuarto orden, como se muestra en la fórmula (3.6).

Definición 3.6: Factor de ponderación para la conductividad térmica

$$f_{He} = A \cdot x_{He}^4 + B \cdot x_{He}^3 + C \cdot x_{He}^2 + D \cdot x_{He}$$
(3.6)

•	f _{He} : Factor de ponderación para conductividad térmica	[adimensional]
•	x _{He} : Fracción molar del Helio	[adimensional]
•	A, B, C, D: Constantes para factor de ponderación	[adimensional]

La <u>Tabla 3.1</u> con los valores de la Fórmula (3.6) se muestra a continuación.

А	В	С	D		
0.347906453473771	0.510111670721423	-0.261037029089498	0.403018904894304		
Tabla 3.1: Constantes para factor de ponderación de conductividad térmica de mezclas					
		{Tabla elaborada	con resultados propios}		

Una vez que se tiene este factor f_{He} , la conductividad térmica se calcula como:

Definición 3.7: Conductividad térmica de una mezcla Helio-Nitrógeno

$$\lambda = f_{He} \cdot \lambda_{He} + (1 - f_{He}) \cdot \lambda_{N_2} \tag{3.7}$$

•	f _{He} : Factor de ponderación para conductividad térmica	[adimensional]
•	λ: Conductividad térmica de la mezcla	$[W/m \cdot K]$
•	λ_{He} : Conductividad térmica del Helio	$[W/m \cdot K]$
•	λ_{N_2} : Conductividad térmica del Nitrógeno	$[W/m \cdot K]$

En resumen, se tiene que tanto el <u>peso molecular</u> como la <u>viscosidad</u> de una mezcla pueden ser calculadas como una interpolación lineal con respecto a las fracciones molares. En tanto, el <u>calor específico</u> puede ser calculado como una interpolación lineal con respecto a las fracciones másicas y la <u>conductiva térmica</u> requiere de una fórmula algo más compleja pero es aún calculable. Para la viscosidad como para la conductividad térmica, el efecto de la presión es despreciable. Pero aún queda la pregunta de cuál es el efecto de la presión sobre el calor específico.

El efecto de la presión en el calor específico es muy significativo a bajas temperaturas. Por ejemplo, para Nitrógeno a 200 K, en un rango entre 0.1 y 3.5 MPa, el calor específico varía en un 17.31%. Ante la imposibilidad de asumir que la presión es despreciable para este caso, se puede buscar alguna expresión que relacione la presión y la temperatura dentro de la tobera. Para esto, se puede hacer uso de las ecuaciones (2.2) de tobera ideal isentrópica que aparecen en el Capítulo 2 del presente informe. De estas ecuaciones se obtiene la presión como función de la temperatura.

Definición 3.8: Presión como función de temperatura en tobera ideal isentrópica

$$P(T) = P_0 \cdot \left(\frac{T}{T_0}\right)^{\frac{\gamma}{\gamma-1}}$$
(3.8)

•	• <i>P(T): Presión como función de la temperatura</i>		[MPa]
•	<i>T</i> :	Temperatura del gas	[K]
•	<i>P</i> ₀ :	Presión a la entrada de la tobera	[MPa]
•	T_0 :	Temperatura a la entrada de la tobera	[K]
•	γ:	Coeficiente de dilatación adiabática	[adimensional]

Asumiendo que la microtobera es adiabática y que el proceso que rige al gas dentro de la microtobera es una expansión isentrópica, se puede obtener la expresión (3.8) que permite entonces caracterizar la variación del calor específico del gas únicamente en términos de la temperatura.

Ya con esto se tienen todos los antecedentes necesarios para caracterizar <u>el peso molecular</u>, <u>el calor específico</u>, <u>la viscosidad</u> y la <u>conductividad térmica</u> de mezclas Helio-Nitrógeno en función de su temperatura. Las funciones generadas son usadas como *inputs* para el modelamiento fluidodinámico. De esta forma, ahora no solo es posible modelar el flujo de Nitrógeno puro o Helio puro a través de microtoberas, sino que también se pueden modelar mezclas binarias entre estos gases.

3.5 Optimización de la geometría de la microtobera

La optimización de la geometría de una tobera no es para nada trivial. Hay que considerar muchos factores como es la velocidad de gas, la temperatura del gas, el efecto de la turbulencia, el ángulo de incidencia de las partículas sobre el sustrato, *Shock diamonds, Bow shock*, etc.

Ante la imposibilidad de manejar todas las variables, se escoge analizar la velocidad que alcanza el gas de trabajo, que es la variable más relevante. Para simplificar la optimización, se utilizan las aproximaciones de tobera ideal de las expresiones (2.1) y (2.2) del presente informe. Es decir, se asume una microtobera ideal, unidimensional e isentrópica.

Esto resulta ser un problema de optimización numérica donde la función objetivo es la velocidad del gas de trabajo a la salida de la microtobera. Sin embargo, se da el caso que para diferentes geometrías de microtobera se alcanza la misma velocidad de salida del gas (asumiendo isentropía). Ante esta situación, se hace necesario fijar algunas variables y establecer una <u>lista de prioridades</u> para elegir entre una configuración de tobera u otra.

Las variables que se mantienen fijas son la presión y temperatura de entrada. Estas variables podrían ser incluidas en la optimización pero siempre se tiene como resultado que la presión y temperatura de entrada óptimas son las máximas admisibles. Para el caso de *Cold Spray*, la temperatura máxima admisible es de 500 °C (773 K), pero se escoge 750 K como temperatura de entrada para tener cierto margen. Para el caso de la presión, hay microtoberas que operan a 5 MPa. Sin embargo, es mucho más común encontrar válvulas que admiten una presión de hasta 3.5 MPa. Considerando que la idea futura es construir alguna de las microtoberas que se presentan en este informe, se decide que la presión de entrada debe ser de 3.5 MPa.

Respecto a la lista de prioridades, ésta es el siguiente:

Lista de Prioridades

- 1.- Se escoge la microtobera que use una mezcla con menor porcentaje de Helio.
- 2.- Se escoge la microtobera que sea más larga (sección divergente).
- 3.- Se escoge la microtobera con mayor diámetro de salida
- 4.- Se escoge la microtobera con menor diámetro de garganta

Esto quiere decir que si hay dos configuraciones de microtobera con la misma velocidad de salida, la primera prioridad es escoger la microtobera que use la menor cantidad de Helio posible. Esto tiene sentido desde el punto de vista de reducir los costos operacionales del proceso. La segunda prioridad, es la tobera que sea más larga. Cuanto más distancia recorra la partícula a través del gas del trabajo, tiene más tiempo para acelerar y naturalmente su velocidad de impacto es mayor, lo que significa aumentar la eficiencia de depósito del proceso.

Las siguientes dos prioridades en realidad corresponden a un solo concepto. La idea en este caso es aumentar el ángulo interno dentro de la sección divergente, pues esto significa que la microtobera es más fácil de construir. Para simplificar la optimización, en lugar de utilizar el ángulo interno de la microtobera como una variable, se usan dos variables, el diámetro de salida y el diámetro de garganta. Naturalmente, maximizar el ángulo interno de la microtobera es lo mismo que maximizar el diámetro de salida y minimizar el diámetro de garganta. Además, se tiene que al maximizar el cuociente entre el diámetro de salida y el diámetro de garganta, también es está maximizando en número de Mach a la salida de la microtobera. La relación entre estos diámetros y el número de Mach a la salida de una tobera ideal se muestra en la siguiente expresión.

Definición 3.9: Relación entre diámetros y numero de Mach a la salida de una tobera ideal

$$\frac{d_e^2}{d_{cr}^2} = \frac{\left(1 + \frac{\gamma - 1}{2} M_e^2\right)^{\frac{\gamma + 1}{2(\gamma - 1)}}}{M_e \left(\frac{\gamma + 1}{2}\right)^{\frac{\gamma + 1}{2(\gamma - 1)}}}$$
(3.9)

•	d_e :	Diámetro de salida	$[\mu m]$
•	d_{cr} :	Diámetro de garganta	$[\mu m]$
•	γ:	Coeficiente de dilatación adiabática	[adimensional]
•	M_e :	Número de Mach a la salida	[adimensional]

Al definir una <u>lista de prioridades</u> se garantiza la <u>unicidad de la solución</u>. Es decir, se va a escoger una única microtobera para cada caso. Si bien, no se está optimizando directamente la velocidad de las partículas, al maximizar la velocidad del gas que es la variable más relevante, indirectamente se está maximizando la velocidad que alcanzan las partículas.

Lo que queda ahora es definir un conjunto de restricciones del problema de optimización. Para ello se elabora una <u>lista de restricciones</u> que es la que se muestra a continuación:

Lista de Restricciones

- 1.- Presión de salida mayor a 0.8 bar (caso 1), y mayor a 0.6 bar (caso 2).
- 2.- Número de Mach a la salida menor a 3.5.
- 3.- Ángulo interno de la sección divergente mayor a 1°.
- 4.- Relación entre el largo de la sección divergente y de diámetro de salida entre 15:1 y 20:1
- 5.- Relación entre el diámetro de salida y el diámetro de garganta entre 1:1 y 3:1
- 6.- Temperatura de salida de la microtobera mayor a 200K.

Las microtoberas suelen obtener flujos sobre-expandidos, ello quiere decir que el flujo sale de la tobera a una presión menor a la presión ambiente, esto produce que el flujo se "comprima" al salir, produciendo que el campo de velocidades forme un patrón con forma de "aguja" a la salida de la microtobera, como se muestra en la <u>Figura 3.6</u>. Esta figura es una modificación de la imagen que puede ser encontrada en [35]. Los colores "calidos" (naranjo, amarillo) representan alta velocidad mientras que los colores "fríos" (verde, celeste, azul) representan baja velocidad.



Figura 3.6: Ejemplo de campo de velocidad de un flujo sobre-expandido a la salida de una tobera

{Figura es una modificación de [35]}

Para que esta "compresión" sea lo menor posible, se busca que la presión a la salida de la microtobera sea cercana a la presión ambiente (1 bar). Por esta razón se impone como restricción que la presión a la salida de la tobera debe ser mayor a 0.8 bar en un primer caso. Luego, para relajar el criterio y obtener velocidades más altas, se plantea un segundo caso menos estricto en el que la presión de salida debe ser mayor a 0.6 bar.

La siguiente restricción es el número de Mach a la salida de la tobera. En el trabajo de Schmidt [36] se ve que en microtoberas lo normal es que el número de Mach a la salida esté en un rango entre 2 y 3.5. Por otra parte, el estudio de Jodoin [37] no logra establecer un número de Mach máximo, pero asegura que bajo condiciones estándar (como una distancia entre la onda de choque y el sustrato de 2 mm), un número de Mach mayor a 3 podría producir pérdida de velocidad. Siendo tal el caso, se considera que un límite de 3.5 es un valor prudente para el número de Mach a la salida de la microtobera.

La tercera restricción es el ángulo interno en la sección divergente. La microtobera más pequeña que existe es la que utiliza Alexey Sova, con un ángulo interno de 0.7° . Este ángulo es demasiado pequeño para las microtoberas convencionales. Para que sea factible construir las microtoberas que se presentan en este trabajo, es necesario que el ángulo interno sea mayor a 1°.

La cuarta restricción tiene que ver con el cociente entre el largo de la región divergente y el diámetro de salida de la tobera. El paper [9], citando al libro *Cold Spray Technology* [38], afirma que idealmente este cociente tiene que estar en un rango entre 15 y 20. Este cociente para las toberas analizadas está en un rango entre 15 y 16.55, es decir, no se alcanza el máximo sugerido.

La quinta restricción es algo redundante, pues es solo una garantía para definir dos cosas. La primera es una obviedad, todas las microtoberas deben ser supersónicas, o a lo menos sónicas, es decir, no puede darse el caso de un diámetro de garganta mayor al diámetro de salida. Lo segundo es asegurarse que el número de Mach sea menor a 3.5, y ello significa un cociente menor a 3.

Respecto a la última restricción, aunque no existe una temperatura mínima sugerida en la literatura, el paper [11] muestra temperaturas de impacto entre 150 y 300 K. Definiendo una temperatura de salida mínima de 200 K, se da que el flujo en la zona *free jet*, más allá de la salida de la tobera, puede alcanzar temperaturas del orden de 150 K. Considerando que la temperatura de las partículas siempre es mayor a la mínima temperatura del gas, se garantiza que la temperatura de las partículas siempre es mayor a 150 K. También se busca evitar una temperatura tan baja para impedir que existan cambios de fase en el gas de trabajo, aunque por lo general el gas alcanza temperaturas bajas y presiones bajas simultáneamente, impidiendo que condense.

Con la lista de prioridades y las restricciones del problema, solo queda la <u>función objetivo</u> del problema de optimización. Es decir, la velocidad del gas a la salida de la microtobera.

Definición 3.10: Velocidad del gas a la salida de una tobera ideal

$$v_e = M_e \sqrt{\gamma R T_e} \tag{3.10}$$

•	v_e :	Velocidad a la salida	[m/s]
•	γ:	Coeficiente de dilatación adiabática	[adimensional]
•	M_e :	Número de Mach a la salida	[adimensional]
•	R:	Constante de gas ideal del gas	[J/kgK]
•	T_e :	Temperatura a la salida	[K]

La temperatura a la salida se calcula con la expresión (2.2.1) y el número de Mach a la salida se calcula con la expresión (3.9). El coeficiente de dilatación es propio de cada mezcla. Ya con esto se tienen todos los antecedentes necesarios para hacer una optimización numérica. Los resultados de la optimización se presentan en el Capítulo 4 de Resultados.

3.6 Modelamiento Fluido-dinámico

3.6.1 Mallado

El primer paso para iniciar una simulación es construir el mallado. En el caso de microtoberas, las mallas presentan buenos resultados cuando tienen más de 200 mil elementos. El tamaño de los elementos de malla no es uniforme. Las mallas de microtoberas deben ser <u>muy fina</u> en la zona de la garganta y a la salida de la tobera, <u>medianamente fina</u> en la sección convergente y en la región de *free jet* cercana al eje axisimétrico, y ya <u>menos fina</u> en la sección divergente de la microtobera y en la región de *free jet* alejada del eje axisimétrico. Cada una de estas regiones del mallado está representada más adelante en la <u>Figura 3.7</u>.

Al definir una malla con más de 200 mil elementos, el tamaño de estos elementos puede variar según las dimensiones particulares que tenga la microtobera en cuestión. Como referencia para el análisis del mallado se decide utilizar la microtobera que alcanza mayores velocidades, que en adelante es mencionada con el nombre de <u>Microtobera N°1</u>. La <u>Tabla 3.2</u> muestra las dimensiones de esta microtobera.

L_{conv} [mm]	L _{div} [mm]	L_{fj} [mm]	D_{fj} [mm]	D _{in} [mm]	D_{cr} [mm]	<i>D_e</i> [mm]
1	42	16	6.8	6	1.3	2.8
	Tabla 3.2: D	imensiones del	volumen de co	ntrol. Microtol	oera N°1	
• L _{conv} :La	rgo sección con	vergente de la	tobera			[mm]
• L _{div} : La	• L _{div} : Largo sección divergente de la tobera					[mm]
• L _{f i} : Largo región de free jet					[mm]	
• D _{fj} : Dia	ímetro región d	e free jet				[mm]
• D _{in} : Die	ámetro de entra	da de la tobera				[mm]
• D_{cr} : Di	ámetro de gargo	unta de la tober	a			[mm]
• D_e : Dia	ímetro de salida	ı de la tobera				[mm]

El volumen de control de la microtobera debe ser separado en varias regiones con diferente tamaño de elemento, como se muestra a modo de ejemplo en la Figura 3.7. El tamaño de cada una de estas regiones se define arbitrariamente pero siempre teniendo cuidado de que exista concordancia con las dimensiones del volumen de control y que siempre se cumpla que las regiones con mallado más fino estén en la garganta y a la salida de la tobera, y que las regiones con mallado menos fino estén en la región divergente y en la región de *free jet* lejos del eje axisimétrico.

La <u>Figura 3.7</u> es una representación visual de las diferentes regiones que componen el mallado de la microtobera de la <u>Tabla 3.2</u>. Más adelante se define el tamaño de malla necesario para cada una de estas regiones.



Este tipo de segmentación del volumen de control se utiliza para el mallado de todas las

microtoberas presentes en este estudio.

En particular para el caso de esta Microtobera N°1, si se desea una malla que tenga más de 200 mil elementos (específicamente de 235476 elementos y 238187 nodos), entonces el tamaño de elemento para cada región es el que se muestra a continuación en la Tabla 3.3.

Zona del Volumen de Control	Dimensiones [mm]	Tamaño de elemento [m]	Tamaño mín. local [m]
Cerca de la garganta	0.2 & 5.6	$1.19 \cdot 10^{-5}$	$3.61 \cdot 10^{-6}$
A la salida de la tobera	5.6 & 3.0	$1.19 \cdot 10^{-5}$	$3.61 \cdot 10^{-6}$
Sección convergente	0.8	$1.61 \cdot 10^{-5}$	$1.08 \cdot 10^{-5}$
Free jet cerca de eje axisimétrico	13 x 1.4	$1.90 \cdot 10^{-5}$	$1.70 \cdot 10^{-5}$
Sección divergente	30.8	$3.18 \cdot 10^{-5}$	$1.44 \cdot 10^{-5}$
Free jet lejos de eje axisimétrico	16 x 2.0	$3.30 \cdot 10^{-5}$	$1.79 \cdot 10^{-5}$

Tabla 3.3: Tamaño de elementos para malla de 235 mil elementos. Microtobera Nº1

En general, el tamaño de los elementos para una malla de más de 200 mil elementos está en ese orden de magnitud, en centésimas de milímetros. El <u>tipo de elemento es rectángular</u> como en todos los casos en que se modelan microtoberas bidimensionalmente.

Aunque empíricamente se sabe que para más de 200 mil elementos, la simulación debe presentar buenos resultados. Es necesario validar este supuesto. Para ello se procede seleccionando la microtobera que tiene el gas de trabajo con la velocidad más alta (la <u>Microtobera N°1</u>) y luego y se prueba con cuatro mallas diferentes. Una de 94 mil elementos, otra de 140 mil elementos, otra de 235 mil elementos y finalmente una del orden de 400 mil elementos.

La malla de <u>400 mil elementos</u> requiere de alrededor de <u>2 semanas de simulación</u> si se usa un paso de tiempo de 10 [ns], paso de tiempo que se utiliza en este trabajo para garantizar que el error asociado a la ecuación de energía y las demás ecuaciones (*residuals*) esté siempre por debajo de 10^{-4} . Por esta razón no es factible trabajar con mallas más finas y se considera que la malla de 400 mil elementos entrega la <u>solución más exacta posible</u>. Entonces, para calcular el error asociado a cada malla, éstas son comparadas con la solución de malla de 400 mil elementos.

Para modificar el número de elementos y crear una malla nueva a partir de una malla ya existente, se puede utilizar la siguiente expresión que relaciona el tamaño y número de elementos de una malla pre-existente con el tamaño y número de elementos de la malla que se desea crear.

Definición 3.11: Fórmula para definir tamaño de elemento de malla nueva

$$l_n \approx l_o \cdot \sqrt{\frac{N_o}{N_n}} \tag{3.11}$$

•	l_n Tamaño de elemento de malla nueva	[m]
•	l_o : Tamaño de elemento de malla pre-existente	[m]
•	N_n : Número de elementos que se desea para malla nueva	[adimensional]
•	N _o : Número de elementos de malla pre-existente	[adimensional]

Así por ejemplo, a partir de la malla de 235 mil elementos representada en la <u>Tabla 3.3</u>, se puede construir una malla de 94 mil elementos (específicamente 93982 elementos y 95722 nodos) si se multiplican los tamaños de elemento por el factor $\sqrt{N_o/N_n} = \sqrt{235.000/94.000} = \sqrt{2.5}$. Los resultados se muestran a continuación en la <u>Tabla 3.4</u>.

Zona del Volumen de Control	Dimensiones [mm]	Tamaño de elemento [m]	Tamaño mínimo local [m]
Cerca de la garganta	0.2 & 5.6	$1.88 \cdot 10^{-5}$	$5.71 \cdot 10^{-6}$
A la salida de la tobera	5.6 & 3.0	$1.88 \cdot 10^{-5}$	$5.71 \cdot 10^{-6}$
Sección convergente	0.8	$2.55 \cdot 10^{-5}$	$1.71 \cdot 10^{-5}$
<i>Free jet</i> cerca de eje axisimétrico	13 x 1.4	$3.00 \cdot 10^{-5}$	$2.69 \cdot 10^{-5}$
Sección divergente	30.8	$5.03 \cdot 10^{-5}$	$2.28 \cdot 10^{-5}$
Free jet lejos de eje axisimétrico	16 x 2.0	$5.22 \cdot 10^{-5}$	$2.83 \cdot 10^{-5}$

Tabla 3.4: Tamaño de elementos para malla de 94 mil elementos. Microtobera Nº1.

Del mismo modo, para obtener una malla de 140 mil elementos (específicamente 140482 elementos y 142581 nodos) basta con multiplicar por el factor $\sqrt{N_o/N_n} = \sqrt{235.000/140.000} = 1.2956$. Los resultados se muestran a continuación en la <u>Tabla 3.5</u>.

Zona del Volumen de Control	Dimensiones [mm]	Tamaño de elemento [m]	Tamaño mínimo local [m]
Cerca de la garganta	0.2 & 5.6	$1.54 \cdot 10^{-5}$	$4.68 \cdot 10^{-6}$
A la salida de la tobera	5.6 & 3.0	$1.54 \cdot 10^{-5}$	$4.68 \cdot 10^{-6}$
Sección convergente	0.8	$2.09 \cdot 10^{-5}$	$1.40 \cdot 10^{-5}$
Free jet cerca de eje axisimétrico	13 x 1.4	$2.46 \cdot 10^{-5}$	$2.20 \cdot 10^{-5}$
Sección divergente	30.8	$4.12 \cdot 10^{-5}$	$1.86 \cdot 10^{-5}$
Free jet lejos de eje axisimétrico	16 x 2.0	$4.28 \cdot 10^{-5}$	$2.31 \cdot 10^{-5}$

Tabla 3.5: Tamaño de elementos para malla de 400 mil elementos. Microtobera Nº1

Para una malla de 400 mil elementos (398593 elementos y 402152 nodos) se multiplica el factor $\sqrt{N_o/N_n} = \sqrt{235.000/400.000} = \sqrt{0.5875}$. Los resultados se muestran en la <u>Tabla 3.6</u>.

Zona del Volumen de Control	Dimensiones [mm]	Tamaño de elemento [m]	Tamaño mínimo local [m]
Cerca de la garganta	0.2 & 5.6	$9.12 \cdot 10^{-6}$	$2.76 \cdot 10^{-6}$
A la salida de la tobera	5.6 & 3.0	$9.12 \cdot 10^{-6}$	$2.76 \cdot 10^{-6}$
Sección convergente	0.8	$1.23 \cdot 10^{-5}$	$8.28 \cdot 10^{-6}$
Free jet cerca de eje axisimétrico	13 x 1.4	$1.46 \cdot 10^{-5}$	$1.30 \cdot 10^{-5}$
Sección divergente	30.8	$2.44 \cdot 10^{-5}$	$1.10 \cdot 10^{-5}$
Free jet lejos de eje axisimétrico	16 x 2.0	$2.53 \cdot 10^{-5}$	$1.37 \cdot 10^{-5}$

Tabla 3.6: Tamaño de elementos para malla de 400 mil elementos. Microtobera N°1.

A continuación en la <u>Figura 3.8</u> se muestra una representación visual de la malla que tiene 235 mil elementos, cuyos tamaños de elementos son los que aparecen en la <u>Tabla 3.3</u>.

Figura 3.8: Representación visual de malla de 235 mil elementos: Microtobera Nº1.

En esta figura se observa claramente la <u>concentración de elementos</u> en la <u>garganta</u> y la <u>salida</u> de la microtobera. También hay alta concentración en la sección convergente. La concentración es menor en la sección divergente y la región de *free jet* adyacente al eje axisimétrico. La zona donde hay menor densidad de elementos es en la región de *free jet* alejada del eje axisimétrico.

Para comparar la solución de las diferentes mallas, no hay necesidad de calcular la velocidad de impacto de todas las partículas, ni la eficiencia de depósito del proceso para cada caso. El elemento más suceptible a cambio ante cualquier variación de la malla es la velocidad de impacto de la partícula de 5 $[\mu m]$. Como su masa es muy pequeña, ante cualquier modificación en la velocidad del flujo, su aceleración, y por tanto su velocidad de impacto, se modifica drásticamente. Así entonces, si se obtiene convergencia al evaluar diferentes soluciones de la velocidad de impacto de la partícula de 5 $[\mu m]$, éste es un indicador de que la solución del campo de velocidades del flujo de gas también está convergiendo.

Asumiendo que <u>la solución más exacta pertenece a la malla de 400 mil elementos</u>, se puede evaluar el error asociado a la implementación de cada una de las otras mallas. Un error menor a un 1% es un buen indicador para validar el uso de mallas con más de 200 mil elementos.

<u>La velocidad de impacto de la partícula de 5 $[\mu m]$ </u> obtenida para cada malla y su error asociado se presenta a continuación en la <u>Tabla 3.7</u>. En tanto que la <u>Figura 3.9</u> muestra la reducción del error conforme aumenta el número de elementos de la malla.

Número de elementos	Velocidad de Impacto [m/s]	Error [%]
94000	891,92	2,25
140000	885,31	1,49
235000	877,79	0,63
400000	872,27	-

Tabla 3.7: Velocidad de Impacto de partículas de 5 μm y error asociado para diferentes mallas



Figura 3.9: Gráfico error de velocidad de impacto vs Número de elementos de la malla.

Se observa que al sobrepasar los 200 mil elementos, el error asociado a la malla es menor a un 1%, en comparación a la malla de 400 mil elementos. Esto indica que es válido utilizar mallas con 200 mil elementos. Utilizar mallas aún más finas no es viable dado que para mallas de alrededor de 200 mil elementos, el tiempo de iteración es de <u>al menos 5 días</u> y en total para este trabajo se deben completar 8 simulaciones diferentes (se requieren en total 40 días de simulación). Si el tiempo de iteración aumenta por ejemplo a 7 días, en total se requerirán 56 días, casi 2 meses, solo para completar las simulaciones, lo cual no es factible para el desarrollo de este trabajo de título.

Tampoco es conveniente utilizar mallas de alrededor de 100 elementos, puesto que el error se duplica sobrepasando el 2%. La experiencia empírica en otros trabajos indica que para mallas de entre 200 mil y 300 mil elementos se obtienen buenos resultados, siempre remarcando en que **la mayor concentración de elementos debe estar en la garganta y la salida de la tobera**, como es el caso para todas las mallas evaluadas en este trabajo.

Para comparar las mallas se utiliza el número de elementos porque es una variable que incluye a toda la malla y no solo un pequeño segmento de ésta, como sería el caso al considerar el tamaño de elemento. Además, como la velocidad de salida del gas depende fuertemente de la relación entre los diámetro de garganta y de salida, y depende débilmente del largo o tamaño de la tobera, se tiene que cuanto más grande es la tobera, menor será el incremento de velocidad del gas respecto al largo de la misma, y por lo tanto, admitirá elementos de tamaño más grande, **conservándose el número de elementos entre la tobera grande y la tobera pequeña**.

Las mallas usadas para el resto de las microtoberas, con sus respectivos tamaños de elementos, aparecen en el <u>Anexo A</u> del presente informe.
3.6.2 Configuración de mezclas Helio-Nitrógeno

Una vez que se tiene una malla, el siguiente paso es configurar las propiedades termodinámicas de las mezclas Helio-Nitrógeno en el programa Ansys FLUENT. Para ello se debe abrir la ventana *Create/Edit Materials* y seleccionar las opciones que aparecen en la <u>Tabla 3.8</u>.

fluid	Motorial Type	
Iluid	Material Type:	
nitrogen (n2)	Fluent Fluid Materials:	
ideal-gas	Density (kg/m3):	
polynomial	Cp (Specific Heat) (j/kg-k):	
polynomial	Thermal Conductivity (w/m-k):	
sutherland	Viscosity (kg/m-s):	
constant	Molecular Weight (kg/kmol):	
inded as towns a dim for	figures aide an ELUENT de los mon	able 29. Car

 Tabla 3.8: Configuración en FLUENT de las propiedades termodinámicas del fluido

Aunque se selecciona la opción *nitrogen*, lo cierto es que las propiedades termodinámicas, como tales, pueden ser modificadas a gusto por el usuario, para así representar el comportamiento de otro tipo de gas al momento de la simulación. Así se pueden simular mezclas Helio-Nitrógeno.

Al momento de seleccionar las opciones *polynomial* o *sutherland*, se debe presionar al costado el botón *Edit*... que permite definir las propiedades del gas numéricamente. Los números que se ingresan al programa dependen de la mezcla Helio-Nitrógeno que se desea simular, y estos números son presentados en el Capítulo 4 de Resultados de este trabajo. Específicamente en la sección de Caracterización de Mezclas Helio-Nitrógeno.

El valor del peso molecular (*Molecular Weight*) es ingresado manualmente. Este valor cambia según la mezcla que se desea simular. Los valores de peso molecular que se utilizan para cada mezcla también aparecen en el Capítulo 4 de Resultados de este informe.

Finalmente, se presiona el botón *Change/Create* para que el programa ingrese los datos. Para que la información del fluido quede asignada al volumen de control, en *Cell Zone Conditions* se hace doble click en *solid-zone1* y se escoge *nitrogen* como gas de trabajo.

Con todo esto, la configuración de la mezcla está terminada y lista para ser usada.

3.6.3 Inicialización y Condiciones de Borde

El modelamiento fluido-dinámico de las microtoberas se lleva a cabo con el programa Ansys FLUENT. En cuanto al *solver*, se utiliza la opción *Density-Based solver* (ver la <u>Figura 2.1</u>) y el modelamiento se hace en <u>modo transiente</u>, con un paso de tiempo de 10 ns $(10^{-8} s)$. La razón para esto es que inicialmente se forman vórtices a la salida de la microtobera (como se explica más adelante en el Capítulo 4 de Resultados) que impiden que se obtenga convergencia si la simulación se lleva a cabo en modo estacionario.

Para alcanzar el régimen estacionario se requiere de alrededor de 18 mil pasos de tiempo, es decir, el régimen transiente dura alrededor de $1.8 \cdot 10^{-4} s$. Por esta razón el régimen transiente no es importante desde el punto de vista operacional (para el estudio del proceso), pero sí es importante para completar el modelamiento CFD.

Las simulaciones se llevan a cabo en computadores *Dell Precision T1700* con 16 Gb de memoria RAM y con procesador de cuatro núcleos y capacidad de procesamiento de 4 GHz, aunque por tratarse de computadores de uso compartido, se utilizan solo dos núcleos de procesamiento. Cada simulación requiere de <u>a lo menos 5 días</u> para ser completada, por lo que para completar ocho simulaciones se requiere de un <u>tiempo mínimo de 40 días</u>.

En cuanto a las condiciones de borde, la <u>Figura 3.10</u> muestra el esquema que las representa. Esta figura es una modificación de la imagen que aparece en [39]. El esquema corresponde a un **plano bidimensional axisimétrico**.



[{]Figura es una modificación de [39]}

La pared encierra lo que se comprende como la microtobera, mientras que el *outlet* encierra la región que se conoce como *free jet*. Se asume que la <u>pared</u> es adiabática y por lo tanto el flujo de calor a través de ella es cero.

El <u>outlet</u> es una salida a presión fija, específicamente a presión ambiente. Se escoge una presión relativa igual a cero como condición de borde. Esto corresponde a una presión absoluta de 101.325 [Pa]. La temperatura también es fija y se escoge 300 [K] como condición de borde.

En cuanto al <u>inlet</u>, éste se refiere a una entrada de gas con presión fija. El programa Ansys FLUENT pide definir dos tipos de presiones, una con nombre *Gauge Total Pressure* que se refiere a la presión relativa, y otra con nombre *Supersonic/Initial Gauge Pressure* que se refiere a una presión inicial arbitraria para inicializar la simulación. Esta presión debe ser un poco más baja que la presión relativa. Para definir la condición de borde se escogen presiones de 3.398.675 [Pa] y 3.398.000 [Pa] respectivamente. Esto para representar una condición de entrada con una presión absoluta de 3.5 [MPa]. En cuanto a la temperatura, el gas ingresa a 750 [K]. Recordar que la máxima temperatura de ingreso admisible es 500 [°C] equivalente a 773 [K]. Al escoger una temperatura de ingreso de 750 [K] se está asumiendo un caso un poco más conservador.

Como método específico de turbulencia, se escoge *Intensity and Viscosity Ratio*, y se mantienen los valores definidos por defecto en el programa. La <u>Tabla 3.9</u> muestra cómo se configuran las condiciones de borde en la entrada de la tobera (*inlet* del volumen de control).

Reference Frame:	Absolute
Gauge Total Pressure (pascal):	3398675
Supersonic/Initial Gauge Pressure (pascal):	3398000
Direction Specification Method:	Normal to Boundary
Specification Method:	Intensity and Viscosity Ratio
Turbulent Intensity (%):	5
Turbulent Viscosity Ratio:	10
Total temperature (k):	750 (constant)
Discrete Phase Type:	escape

Tabla 3.9: Configuración en FLUENT de condiciones de borde para el inlet del volumen de control

Queda definir la discretización numérica. Esto se hace en la ventana *Solution Methods* de FLUENT. La configuración se muestra a continuación en la <u>Tabla 3.10</u>.

Formulation: Implicit Flux Type: Roe-FDS Gradient: Least Squares Cell Based Flow: Second Order Upwind Turbulent Kinetic Energy: Second Order Upwind Turbulent Dissipation Rate: Second Order Upwind Tabla 3.10: Configuración en FLUENT de la discretización numérica

La tolerancia del error o residuo de las ecuaciones se configura como 10^{-6} para todos los casos en la ventana *Residual Monitors*, aunque también se selecciona un máximo de 25 iteraciones por paso de tiempo, lo que se traduce en un residuo máximo de 10^{-4} para la ecuación de energía. El tipo de inicialización es *Hybrid Initialization*. En este punto ya se tiene toda la información suficiente para iniciar la simulación del flujo de gas.

3.6.4 Modelamiento de las partículas

| Los modelos utilizados para las simulaciones son los detallados en el Capítulo 2 de Modelos del presente informe. Estos son el <u>Modelo $k - \varepsilon$ estándar</u> para el gas, modelo *high-Mach-number* para el arrastre de partículas (conocido como <u>Aproximación de Henderson</u>), el modelo estocástico <u>Discrete Random Walk</u> para incluir aleatoriedad en el arrastre de las partículas en flujo turbulento, y el método <u>Standard Wall Functions</u> para el tratamiento en la vecindad de la pared

Para usar la Aproximación de Henderson, se definen dos parámetros. Uno es el número de intentos, es decir, cuántos lanzamientos de partículas se llevan a cabo para partículas de igual tamaño y con las mismas condiciones de operación. Se escoge 100 como número de intentos. Es decir, <u>se prueba con 100 partículas</u> en condiciones completamente iguales, excepto que las partículas están sometidas a un campo de velocidades del gas que fluctúa aleatoriamente, y por lo tanto, estas 100 partículas obtendrán resultados diferentes.

Es importante recalcar que <u>las partículas se modelan individualmente y NO como un flujo</u> <u>de partículas</u>. La partícula se modela individualmente hasta que sale del volumen de control, luego se modela la siguiente y así sucesivamente. La dispersión de datos que se obtiene al calcular la velocidad y temperatura de impacto de las partículas <u>es resultado exclusivo del modelo estocástico</u>.

El segundo parámetro es el tipo de tiempo de vida de los "remolinos" o fluctuaciones que se generan en el campo de velocidades (*Characteristic lifetime of the eddy*). Existen dos opciones, una "constante" que en realidad se refiere a una constante que multiplica el cociente k/ε , y la otra "aleatoria" que se refiere a una variable aleatoria que multiplica al cociente k/ε . Las fórmulas que explican estos dos casos aparecen previamente en este informe en (2.22.1) y (2.22.2) respectivamente. No hay gran diferencia en cuanto a los resultados que se obtienen para cada caso, por lo cual se escoge la opción "constante". A continuación, la <u>Tabla 3.11</u> muestra cómo configurar el modelo estocástico *Discrete Random Walk*.

Discrete Random Walk Model	[√]
Random Eddy Lifetime	[]
Cloud Model	[]
Number of Tries	100
Time Scale Constante	0.15

Tabla 3.11: Configuración en FLUENT de modelo estocástico Discrete Random Walk

Con respecto a las partículas propiamente tal, el material que las conforma es Cobre. El programa Ansys FLUENT por defecto define la densidad del Cobre como $\rho = 8978 \ kg/m^3$ y su calor específico como $C_p = 381 J/kgK$.

Otros parámetros necesarios son el diámetro de la partícula y la temperatura con la que ingresa al volumen de control. Para efectos de este trabajo, se modelan <u>nueve diámetros de partícula</u> diferentes. Estos son 5 μ m, 10 μ m, 15 μ m, 20 μ m, 25 μ m, 30 μ m, 35 μ m, 40 μ m y 45 μ m. En cuanto a la temperatura de ingreso, se prueba con <u>dos temperaturas diferentes</u>. Estas son 300 K (temperatura ambiente) y 640 K (temperatura de garganta).

Todo esto quiere decir que se modelan 18 casos para cada configuración de microtobera. Tratándose de ocho configuraciones diferentes, en total se evalúan 144 casos. Y considerando que para cada caso se modelan 100 partículas con el objetivo de probar el modelo estocástico, entonces en total se modelan 14.400 partículas para la realización de este trabajo.

A continuación la <u>Tabla 3.12</u> muestra cómo configurar las condiciones iniciales de ingreso de la partícula al volumen de control. Además de las variables ya mencionadas, también se debe definir la velocidad de ingreso, que para este trabajo es igual a cero en todos los casos.

	Material:	copper
	Diameter Distribution:	uniform
	Diameter (m):	"definido por el usuario"
	Temperature (k):	"definido por el usuario"
	Velocity Magnitude (m/s):	0
	Total Flow Rate (kg/s):	1e-20
0.4.0		1

 Tabla 3.12: Configuración en FLUENT de condiciones de ingreso de las partículas

En un escenario real, el ingreso de las partículas al volumen de control ocurre desde la garganta de la microtobera, en un punto adyacente a la pared, en donde se ubica el inyector de polvo metálico. Para lograr esto, se escoge que el tipo de inyección sea de superficie (la opción *Injection Type: surface*). La Figura 3.11 es un recordatorio de los elementos que componen la malla y el volumen de control, mientras que la Figura 3.12 muestra cual es la línea o "superficie" escogida para el ingreso de las partículas al volumen de control.



Eje axisimétrico

Figura 3.11: Esquema regiones con diferente tamaño de elementos en el volumen de control Zonas con mallado muy fino (rojo), medianamente fino (naranjo) y menos fino (amarillo).



Figura 3.12: Esquema *inlet* del gas de trabajo e *inlet* de las partículas Bordes que comprenden el *inlet* del gas (azul), Borde que comprende el *inlet* de las partículas (rojo)

Como se observa en la <u>Figura 3.11</u>, la sección divergente puede ser dividida en 3 partes y la región de *free jet* en 6 partes. En tanto, en la <u>Figura 3.12</u> se observa que la sección convergente puede ser dividida en 8 partes. Esta forma de dividir el volumen de control tiene dos propósitos. El primero es definir subregiones de acuerdo a cuán fina se desea la malla. El segundo propósito es obtener varios bordes que pueden actuar como *inlets* para así tener más control sobre las variables del problema. Aunque para este trabajo simplemente se establece que los 5 bordes a la entrada de la tobera pertenecen a un único *inlet* por el que ingresa el gas de trabajo al volumen de control.

En la <u>Figura 3.12</u> también se puede ver que hay dos bordes en la zona de la garganta de la tobera desde los cuales las partículas pueden hacer ingreso al volumen de control. En este caso se escoge únicamente el borde que está más alejado del eje axisimétrico, puesto que comúnmente en los procesos de *Cold Spray* el ingreso de las partículas se produce en un punto cercano a la pared de la microtobera como se muestra previamente en la <u>Figura 1.1</u> del Capítulo 1 de Antecedentes.

No obstante, la idea es lograr que las partículas hagan ingreso al volumen de control desde un <u>único punto definido</u> y no desde cualquier punto del borde seleccionado. Para esto, al momento de procesar los datos de la velocidad y temperatura de las partículas, se debe escoger la opción *Track Single Particle Stream* y el número 1 para el índice de la partícula (*Stream ID*) en la ventana *Particle Tracks* de Ansys FLUENT. Al hacer esto, las partículas ingresan a la tobera desde un punto de la garganta aledaño a la pared como se muestra en la <u>Figura 3.13</u>. Esto se asemeja a un escenario real de *Cold Spray*.



Figura 3.13: Punto de ingreso de las partículas y trayectoria de las mismas

Finalmente, queda configurar aspectos del modelo de fase discrete (*DPM – Discrete Phase Model*). La configuración se muestra a continuación en la <u>Tabla 3.13</u>.

Interaction with Continuous Phase:	[]
Unsteady Particle Tracking:	[]
Max. Number of Steps:	50000
Step Length Factor:	5
Accuracy Control:	[]
Tolerance:	1e-06
Max. Refinements:	100
	1 1 1 0

 Tabla 3.13: Configuración en FLUENT del modelo de fase discreta

Respecto a los demás parámetros, se mantienen los valores por defecto. De esta manera ya se tiene toda la información necesaria para simular la trayectoria de las partículas a lo largo de la tobera y así obtener la velocidad y temperatura de las mismas en función de la trayectoria.

Los resultados se obtienen en la ventana *Particle Tracks*. Lo primero es seleccionar la casilla *Track Single Particle Steam* para asegurarse que hay un único punto de ingreso de las partículas. Para visualizar la velocidad, temperatura o alguna otra propiedades de las partículas, se debe seleccionar la opción *Color by: Particle Variables…* y luego se selecciona la propiedad específica que se desea visualizar. Con esto, al apretar el botón *Save/Plot* se obtiene una imagen de la trayectoria de las partículas coloreada de acuerdo a cómo varía el valor de la propiedad.

Para visualizar el valor de la propiedad como función del largo de la trayectoria, se debe seleccionar la casilla *XY Plot* y luego la opción *X Axis Function: Path Length*. Nuevamente apretando el botón *Save/Plot* se obtiene una gráfica de la propiedad vs la trayectoria para un total de 100 partículas. La dispersión de los datos es producto de la aplicación del modelo estocástico.

Finalmente, para exportar los datos, se mantiene seleccionada la casilla *XY Plot* y luego se selecciona la casilla *Write to File*. Al apretar el botón *Save/Write* los datos se exportan en un formato llamado .xy que puede ser leído por lectores de texto.

Este procedimiento debe ser repetido para los 9 tamaños de partícula, para las dos temperaturas de ingreso elegidas y para las tres propiedades que son de interés, en este caso <u>posición en x</u>, <u>velocidad</u> y <u>temperatura</u>. Eso quiere decir que el procedimiento se repite 54 veces, o sea se generan 54 archivos .xy para cada microtobera. Considerando que para este trabajo se estudian ocho microtoberas, entonces en total <u>se deben procesar 432 archivos para este trabajo</u>. El código para el procesamiento de estos datos se detalla más adelante en el Anexo F.

Capítulo 4

Resultados

4.1 Primeras pruebas con Ansys FLUENT

En el estudio de microtoberas para *Cold Spray*, entre los investigadores más destacados se encuentra Alexey Sova, quien dispone de una microtobera de 20 mm de largo (región divergente), con un diámetro de salida de 1 mm. Esta microtobera es significativamente más pequeña que las toberas que se prueban en este trabajo. Sova también ha logrado con relativo éxito depositar Aluminio, Cobre y Zinc por medio de esta microtobera.

El trabajo de Sova es una prueba de que es factible construir microtoberas y que éstas pueden efectivamente ser usadas para el proceso de *Cold Spray*. Sin embargo, aún hay inconvenientes en cuanto al espesor efectivo del recubrimiento que esta microtobera puede generar y en cuanto al costo operacional de ésta. Todos los trabajos de Sova que se mencionan en este informe fueron llevados a cabo utilizando Helio como gas de trabajo. De allí nace la idea de probar con microtoberas que sean más grandes pero que permitan utilizar mezclas Helio-Nitrógeno.

Sova para sus trabajos utiliza el software Ansys FLUENT. Para hacer las primeras pruebas con este programa se escoge el paper "Velocity of the Particles Accelerated by Cold Spray Micronozzle: Experimental Measurements and Numerical Simulation" [12].

Para hacer la validación de este paper se utiliza el modelo Spalart-Allmaras y se escoge un factor de forma de 0.835 que es un parámetro del modelo. No se ahonda en los detalles de este modelo porque en definitiva no es el que se usa para este trabajo de título.

El gas de trabajo es Helio puro, la temperatura de entrada es 300 K y la presión de entrada en la tobera es 2 MPa y 3 MPa y las pruebas se realizan con Aluminio, Cobre y Zinc. Los modelos del flujo de gas y de arrastre de partículas están desacoplados. Además, el modelo Spalart-Allmaras es incompatible con el modelo estocástico DRW, por lo que solo se simulan partículas individuales.

Con respecto al flujo de gas para una presión de entrada de 2 MPa, la comparación entre los resultados de Sova y los resultados de este trabajo es la que se muestra en la Figura 4.1:



Figura 4.1: Flujo de Helio en microtobera de Sova, con presión de entrada de 2 MPa Resultado del paper [12] (arriba), Resultado de la validación (abajo).

Para ambos casos se obtiene un flujo resulta ser sobre-expandido. Esto se produce cuando el gas sale a una presión menor a la presión ambiente, entonces sufre una "contracción", lo que se refleja en una forma de tipo "aguja" del campo de velocidades a la tobera. También se tiene que para ambos casos la velocidad máxima es cercana a 1400 m/s.

Para el caso de una presión de entrada de 3 MPa, el resultado se muestra en la Figura 4.2:



Figura 4.2: Flujo de Helio en microtobera de Sova, con presión de entrada de 3 MPa Resultado del paper [12] (arriba), Resultado de la validación (abajo).

Al igual que en caso anterior, la velocidad máxima está cercana a 1400 m/s. El efecto del aumento de la presión de entrada se observa al notar que el alcance del flujo de alta velocidad a la salida de la tobera es mayor. Esto se debe a que al ser mayor la presión de entrada, también aumenta la presión de salida y el efecto de la contracción producida por la presión ambiente es menor.

El siguiente paso es modelar el arrastre de las partículas para cada caso. Se utiliza el modelo de Haider y Levenspiel [31], que en FLUENT aparece con el nombre de *Nonspherical Drag Law*.

Entre los metales usados en *Cold Spray*, el Aluminio entrega mejores resultados, por tener una baja densidad, lo que significa una mayor aceleración, y por tener mayor calor específico, lo que significa que tiene una mayor "<u>inercia térmica</u>", es decir, la temperatura de la partícula sufre menor cambio ante los cambios de temperatura del gas por el que atraviesa.

A continuación, en la <u>Figura 4.3</u>, se muestran los resultados para la velocidad de las partículas de aluminio, las que resultan ser velocidades más altas que las del Cobre y el Zinc.





- a) Resultado del paper [12] con presión de entrada 2 MPa
- b) Resultado del paper [12] con presión de entrada 3 MPa
- c) Resultado de la validación con presión de entrada 2 MPa
- d) Resultado de la validación con presión de entrada 3 MPa

Como se puede observar, incluso para las partículas más grandes de 40 μm , las partículas de Aluminio siempre alcanzan una velocidad mayor a 450 m/s. No obstante, esto no ocurre para las partículas de Cobre ni para las de Zinc, como se observa en la Figura 4.4 para el caso del Cobre.



Para el caso del Cobre, la velocidad máxima que alcanzan las partículas de 20 μm es apenas sobre los 450 m/s, mientras que para el caso del Aluminio es de unos 700 m/s.

El Zinc obtiene resultados un poco mejores que las partículas de Cobre, y esto se debe a que su densidad es un poco menor. La velocidad máxima que alcanzan las partículas de Zinc es cercana a los 500 m/s para partículas de 20 μm , como se observa a continuación en la Figura 4.5.



En definitiva, el Cobre muestra ser el metal que obtiene los peores resultados en cuanto a velocidad para una misma microtobera y para las mismas condiciones de operación. El Cobre es más denso que el Aluminio, Zinc y Titanio, materiales usualmente usados en *Cold Spray*, y esto explica los resultados obtenidos.

Esto evidencia que el diseño de microtoberas de *Cold Spray* para obtener depósito de Cobre es una tarea no trivial, pues hay que disminuir el tamaño de las mismas, pero al mismo tiempo lograr que un material tan pesado como el Cobre pueda alcanzar altas velocidades.

Se observa que los resultados obtenidos son similares a los del paper de Sova citado [12]. No obstante, este no es el modelo final utilizado para este trabajo. El objetivo de usar este modelo es realizar pruebas preliminares con el software, con un modelo que sea relativamente sencillo.

4.2 Validación del modelo definitivo

El modelo escogido para realizar este trabajo de título es el propuesto en el paper "Deposition of aluminum powder by cold spray micronozzle" [9]. La razón para utilizar este paper es porque incluye el modelo estocástico DRW y porque está validado experimentalmente.

En este paper se propone el uso del modelo $k - \varepsilon$ estándar, de la aproximación de Henderson para el arrastre de partículas y el modelo estocástico DWR. Todo explicado en el Capítulo 2 de Modelos y Métodos Numéricos del presente informe.

En este caso se trabaja con la microtobera que dispone Sova de 20 mm de largo (sección divergente), con un diámetro de garganta de 0.5 mm y un diámetro de salida de 1 mm. Una imagen de esta microtobera se ve en la Figura 4.6.



Figura 4.6: Microtobera de Sova junto a moneda de 10 Centavos de Euro

{Figura extraída de [9]}

El gas de trabajo es Helio que entra a temperatura ambiente (300 K) y la presión de entrada es 5 MPa. Este paper trabaja con partículas de Aluminio cuya densidad es de $\rho = 2719 kg/m^3$ y calor específico $C_p = 871 J/kg - K$.

Las partículas son "pre-mezcladas" con el gas e ingresan por la entrada de la microtobera y no desde la garganta como suele ocurrir con *Cold Spray*. Eso puede deberse a que las partículas ingresan a temperatura ambiente, lo que reduce el riesgo de que se adhieran a las paredes de la microtobera y se produzca una obstrucción.

Si bien, la idea inicial era representar el flujo de gas únicamente en estado estacionario, durante la validación del paper se detectó que no existía convergencia y por tanto se optó por modelar el flujo en estado transiente hasta alcanzar el régimen estacionario que es de interés para el estudio del proceso de *Cold Spray*. Al hacer esto, se identificó la formación de vórtices en fases transientes del flujo como se observa a continuación en la <u>Figura 4.7</u>:



Figura 4.7: Campo de velocidades y formación de vórtices a la salida de la microtobera Evaluado en $t = 1.0145 \cdot 10^{-5} s$ (arriba). Evaluado en $t = 2.3201 \cdot 10^{-5} s$ (abajo).

La fase transiente dura alrededor de $3.78 \cdot 10^{-5}$ s por lo que no es de interés para estudiar la depositación de las partículas y el proceso de *Cold Spray* en general, pero sí es relevante para obtener convergencia en el modelamiento del flujo de gas que en definitiva es utilizado para calcular la velocidad y temperatura de impacto de las partículas.

Una vez que termina la fase transiente y se alcanza la fase estacionaria, los resultados son los que se muestran en la <u>Figura 4.8</u> y la <u>Figura 4.9</u>.



Figura 4.8: Campo de velocidades en microtobera de Sova, con presión de entrada de 5 MPa Resultado del paper [9] (arriba), Resultado de la validación (abajo).



Figura 4.9: Campo de temperaturas en microtobera de Sova, con presión de entrada de 5 MPa Resultado del paper [9] (arriba), Resultado de la validación (abajo).

La diferencia de tamaño entre las imágenes que aparecen en el paper [9] y las imágenes de la validación (Figura 4.8 y Figura 4.9) se debe únicamente a que para la validación se evaluó una región más grande con el objetivo de describir mejor el flujo de gas. Al obtenerse resultados similares a la salida de la tobera, se da por validado el modelo del flujo de gas.

Respecto al arrastre de las partículas, se utiliza la aproximación de Henderson y el modelo estocástico mencionados en el Capítulo 2 del presente informe. El paper [9] menciona que la medición de la velocidad de las partículas se hace con una cámara con tiempo de exposición $10 \ \mu s$ y en un rango entre 1 mm y 6 mm desde la salida de la microtobera. Por esta razón, para la validación del modelo y la determinación de la velocidad de impacto de las partículas, se escoge una distancia a 6 mm desde la salida de la microtobera.

Las partículas ingresan por la entrada de la microtobera, y no desde la garganta, a una distancia de $2 \cdot 10^{-5} m$ desde el centro o eje axisimétrico. Esta distancia no es especificada en ninguna parte del paper por lo que es escogida arbitrariamente. Notar que las partículas no pueden ser iniciadas desde algún punto del eje axisimétrico, ya que estos puntos tienen una velocidad vertical nula, lo que significaría que todas las partículas se moverían en trayectorias horizontales perfectas, lo que no se condice con la realidad. En total se lanzan 100 partículas para observar la dispersión de los resultados como consecuencia del uso del modelo estocástico DRW. Una representación visual de la dispersión de las partículas se muestra en la Figura 4.10.



Figura 4.10: Representación visual de la trayectoria y velocidad de 100 partículas de Aluminio de $5\mu m$ de diámetro como consecuencia del uso del modelo estocástico DRW

Como se observa, conforme las partículas avanzan a través de la microtobera, no solo aumenta la variación de la velocidad, sino que también aumenta la dispersión de la trayectoria misma de las partículas. Recordar que la componente vertical de la velocidad también está sometida al modelo DRW, y esto explica esta variación en la trayectoria. La <u>Figura 4.11</u> y <u>Figura 4.12</u> se muestran los resultados obtenidos para la velocidad y temperatura de impacto, respectivamente, para partículas de entre 5 y 45 μm . Para cada tamaño diferente se proyectan 100 partículas y se observa la dispersión de datos. Es importante mencionar que <u>los valores en cuadrado corresponden a promedios</u>, mientras que <u>los valores a los extremos</u> <u>corresponden a máximos y mínimos</u> entre los resultados de las <u>100 partículas proyectadas</u>. Por velocidad de impacto se entiende la velocidad axial a 6 mm desde la salida de la tobera.



Figura 4.11: Velocidad de impacto vs Diámetro de partículas de Aluminio Resultados del paper [9] (Azul) y Resultados de la validación (Rojo)

Los valores de los extremos representan máximos y mínimos mientras que los valores encerrados en cuadrados representan valores promedios. La diferencia entre los valores del paper y los resultados de la validación pueden deberse a que la distancia entre el punto de lanzamiento de las partículas y el eje axisimétrico fue escogida arbitrariamente, además de que no se específica a qué distancia desde la salida de la microtobera se considera como la posición de impacto.

Tampoco se especifica si se utiliza Eddy lifetime aleatorio o constante. Para la validación se usó Eddy lifetime constante. A pesar de todo lo anterior, los valores promedios difieren entre un 2% a un 13% respecto a los valores del paper, lo que está dentro del rango admisible.



Temperatura de Impacto vs Tamaño de Partículas

Figura 4.12: Temperatura de impacto vs Diámetro de partículas de Aluminio Resultados del paper [9] (Azul) y Resultados de la validación (Rojo).

Con respecto a la temperatura de impacto, nuevamente los resultados obtenidos son similares a los del paper. Los valores promedios difieren hasta en un 13% para las partículas de 5 μ m y casi 0% para partículas de 20 μ m. Por lo tanto, se da por validado el modelo de intercambio de calor entre las partículas y el gas.

El paper [9] no solo se limita al modelamiento fluido-dinámico, sino que también procede a la validación experimental, para la cual se tiene que la distribución del tamaño de las partículas de Aluminio es conocida, como se muestra a continuación en la Figura 4.13.



Figura 4.13: Distribución del tamaño de partícula del polvo de Aluminio

{Figura extraída del paper [9]}

Considerando que la distribución del tamaño de partículas es conocida y además se conoce el rango de las velocidades de impacto para cada tamaño de partícula, entonces se puede intentar predecir el la distribución de velocidades que ha de obtenerse en un ensayo experimental.

No obstante, hay que tener algunas cosas en consideración. La medición de velocidad se hace por medio de una cámara fotográfica con tiempo de exposición de $10 \,\mu s$. La luz es proporcionada por una fuente externa (puede ser una lámpara), ésta rebota en la partícula e incide sobre el foto-receptor que toma la fotografía. La imagen resultante (fotografía) es una línea o haz de luz cuyo largo va a representar la trayectoria de la partícula en el intervalo de exposición. De acuerdo a este largo se deduce la velocidad media de la partícula durante el tiempo de exposición. Por las características del procedimiento, la cámara es incapaz de detectar partículas menores a $10 \,\mu m$ y eventualmente puede tener dificultad para detectar partículas de $15 \,\mu m$.

En consecuencia, dado que la distribución del tamaño de partículas del polvo de Aluminio es conocida, el rango de velocidad de impacto para cada tamaño de partícula es conocida y finalmente descartando las partículas menores a 15 μm que no pueden ser detectadas por la cámara, se obtiene la siguiente distribución de velocidades de impacto que se muestra en la Figura 4.14:



Figura 4.14: Predicción de la distribución de la velocidad de las partículas de Aluminio a 6 mm desde la salida de la microtobera

Esta distribución significa que la velocidad media de las partículas es 626,89 m/s, mientras que la medición experimental del paper [9] muestra que la velocidad media es 607 m/s. Es decir, el modelo logra predecir la velocidad media de las partículas con un error de un 3,28%.

La <u>Figura 4.11</u>, <u>Figura 4.12</u> y <u>Figura 4.14</u> son obtenidas por medio de Matlab. Los códigos y el procedimiento en cuestión se muestran en el <u>Anexo B</u>.

Con esto se dan por validados los modelos del paper [9] "*Deposition of Aluminum Powder* by *Cold Spray Micronozzle*". Queda entonces utilizar este modelo pre-existente para desarrollar este trabajo de título, aunque es muy importante mencionar algunas modificaciones.

En primer lugar, este trabajo de título estudia microtoberas para **partículas de Cobre**, mientras el trabajo de Sova [9] lo hace para partículas de Aluminio. En segundo lugar, este trabajo incorpora **mezclas Helio-Nitrógeno**, mientras el paper utiliza únicamente Helio puro. Desde un punto de vista teórico, no hay razones para creer que con estas modificaciones se vea afecta la validez del modelo. Por consiguiente, se asume que el modelo recién validado con partículas de Aluminio y Helio, también es valido para ser usado con partículas de Cobre y mezclas de gases.

4.3 Caracterización de mezclas Helio-Nitrógeno

Las mezclas que son de interés para este trabajo son aquellas con fracción molar de Helio igual a 0% (Nitrógeno puro), 10%, 20%, 28%, 40% y 60%. La razón para escoger estas mezclas se explica más adelante. En particular, se puede mencionar que las mezclas de 28% y 60% Helio corresponden a óptimos bajo ciertas condiciones de diseño, mientras que el resto de las mezclas son valores intermedios entre estos óptimos y el Nitrógeno puro.

Para caracterizar las propiedades termodinámicas de estas mezclas binarias, primero se grafican sus propiedades como función de la temperatura (recordar que se eliminó la dependencia de la presión asumiendo expansión adiabática) y luego se procede a una interpolación de segundo orden para caracterizar numéricamente el calor específico C_p y la conductividad térmica λ .

Que la interpolación sea de segundo orden no es arbitrario y de hecho hay que tener mucho cuidado con este punto. Recordar que la temperatura del gas puede variar en un rango muy amplio, entre 150 y 750 K. Si se interpola en un orden n mayor, cualquier error de aproximación de los coeficientes se verá amplificado T^n veces, siendo T la temperatura evaluada.

Otro motivo para hacer una interpolación de orden 2 es que el calor específico C_p no puede ser menor a cero. Naturalmente es muy difícil encontrar una base de datos que incluya temperaturas muy bajas (menos de 200 K) y presiones muy bajas (menos de 1 bar). Si uno realiza una interpolación para caracterizar determinada propiedad en cierto rango de temperaturas, esa interpolación será válida solo en ese rango y no hay garantía de su validez fuera de él. Si al momento de realizar el modelamiento fluido-dinámico el programa requiere evaluar la propiedad a una temperatura que está fuera de rango, el programa utilizará directamente la fórmula que fue usada como *input* sin importar si está en el rango de validez o no, y muy posiblemente puede darse el caso que alguna propiedad se haga menor a cero, como fue el caso del calor específico C_p durante algunas pruebas fallidas con el programa.

Al hacer una interpolación de orden 2 estamos garantizando que la función que describa al C_p es una parábola convexa, por lo tanto, es siempre mayor que cero. Además, si el mínimo de la parábola está en torno a 200 K, es decir, si su derivada se hace cero en torno a esa temperatura, entonces, al evaluar C_p a una temperatura menor a 200 K tenemos que el resultado de la función será aproximadamente similar al valor de C_p cuando T=200 K. Con esto se garantiza que la función no va a divergir si se evalúa fuera de rango. Precisamente, todas estas condiciones se cumplen si se escoge utilizar interpolación de orden 2.

En adelante, todas las constantes de cada interpolación de segundo orden serán referidas como a_2 , a_1 y a_0 , como se muestra a continuación:

Definición 4.1: Interpolación de segundo orden para propiedades termodinámicas

$$\varphi = a_2 \cdot T^2 + a_1 \cdot T + a_0 \tag{4.1}$$

- φ: Propiedad termodinámica
- T: Temperatura del gas
- *a*₀, *a*₁, *a*₂: Constantes de interpolación

Se hará uso de interpolación de orden 2 para el calor específico C_p y para la conductividad térmica λ . No así para el caso de la viscosidad μ , puesto que existe la Ley de Sutherland, que aunque tiene un error un poco más alto, describe la variación de viscosidad de una forma más sencilla. La Ley de Sutherland aparece antes mencionada como la ecuación (3.5) en este informe.

4.3.1 Nitrógeno puro

Utilizando la metodología planteada en la <u>Sección 3.4</u> de este informe y la base de datos provista por *Peace Software* [33], las propiedades del Nitrógeno son representadas como se muestra en la <u>Figura 4.15</u>, <u>Figura 4.16</u> y <u>Figura 4.17</u>.



Figura 4.15: Calor específico Cp del Nitrógeno como función de la temperatura Valores obtenidos de la base de datos (azul), Interpolación de segundo orden (rojo).



Figura 4.16: Conductividad térmica del Nitrógeno como función de la temperatura Valores de la base de datos (azul), Interpolación de segundo orden (rojo).



Figura 4.17: Viscosidad del Nitrógeno como función de la temperatura Valores de la base de datos (azul), Interpolación de segundo orden (rojo). Ley de Sutherland (verde).

El formato de la base de datos y el código para los gráficos se muestran en el Anexo C.

4.3.2 Resumen de resultados para mezclas

Gráficos como los de la <u>Figura 4.15</u>, <u>Figura 4.16</u> y <u>Figura 4.17</u> pueden ser generados para cualquier mezcla Helio-Nitrógeno utilizando el código en Matlab presentado en el <u>Anexo C</u>. Sin embargo, para que la lectura resulte menos tediosa y repetitiva, estos resultados son apartados en el <u>Anexo D</u> de este informe. Por lo que a continuación se presenta un resumen de resultados para las propiedades termodinámicas de las mezclas Helio-Nitrógeno.

Respecto al peso molecular, la <u>Tabla 4.1</u> muestra el resultados para todas las mezclas Helio-Nitrógeno evaluadas.

Nitrógeno	10% Helio	20% Helio	28% Helio	40% Helio	60% Helio
28.01	25.61	23.21	21.29	18.40	13.60

Con respecto a las demás propiedades, la <u>Figura 4.18</u>, <u>Figura 4.19</u> y <u>Figura 4.20</u> representan la variación del <u>calor específico</u>, <u>conductividad térmica</u> y <u>viscosidad</u> como función de la temperatura y también de la misma fracción molar de la mezcla.



Variación del CALOR ESPECÍFICO Cp en mezclas Helio-Nitrógeno

Figura 4.18: Variación del calor específico Cp para mezclas Helio-Nitrógeno



Figura 4.19: Variación de la conductividad térmica en mezclas Helio-Nitrógeno



Figura 4.20: Variación de la viscosidad en mezclas Helio-Nitrógeno

Se observa que al aumentar la fracción molar de Helio en la mezcla, se produce un **incremento en el valor de todas las propiedades del gas** (excepto el peso molecular). Este incremento es muy significativo para el calor específico y la conductividad térmica. No así para la viscosidad, puesto que <u>las viscosidades del Helio y del Nitrógeno son muy parecidas</u>.

Es interesante notar que al utilizar el supuesto de expansión isentrópica para desprenderse de la dependencia de la presión, se observa que <u>el calor específico varía muy poco</u>. A pesar de esto, para el desarrollo de este trabajo se decide considerar el leve incremente del Cp en función de la temperatura y no asumir que esta propiedad es constante.

También es interesante notar que <u>prácticamente la conductividad térmica varía linealmente</u> en función de la temperatura. De hecho, al utilizar una interpolación polinomial, el coeficiente de segundo orden a_2 está en el rango de $10^{-8} W/m \cdot K$ (veáse la <u>Definición 4.1</u>). Nuevamente en este caso de decide no asumir linealidad y trabajar la conductividad térmica como un polinomio de segundo orden. A continuación, la <u>Tabla 4.2</u>, <u>Tabla 4.3</u> y <u>Tabla 4.4</u> contienen los coeficientes y parámetros necesarios para definir numéricamente las propiedades termodinámicas de las mezclas.

Calor específico

Constante	onstante Nitrógeno 10% I		20% Helio	28% Helio	40% Helio	60% Helio		
a_0	1055.44	1120.34	1198.67	1274.05	1416.58	1787.95		
a_1	-0.1298	-0.1275	-0.1250	-0.1227	-0.1186	-0.1084		
a_2	0.00028	0.00027	0.00027	0.00026	0.00025	0.00023		

 Tabla 4.2: Coeficientes para calcular el calor específico Cp [J/kg-K]

Conductividad térmica

Constante	Nitrógeno	10% Helio	20% Helio	28% Helio	40% Helio	60% Helio
a_0	0.00453	0.00591	0.00722	0.00834	0.01034	0.01552
a_1	$7.534 \cdot 10^{-5}$	$8.810 \cdot 10^{-5}$	$1.003 \cdot 10^{-4}$	1.106· 10 ⁻⁴	$1.290 \cdot 10^{-4}$	$1.761 \cdot 10^{-4}$
<i>a</i> ₂	-1.458· 10 ⁻⁸	-1.768· 10 ⁻⁸	$-2.065 \cdot 10^{-8}$	-2.315· 10 ⁻⁸	$-2.758 \cdot 10^{-8}$	$-3.881 \cdot 10^{-8}$

Tabla 4.3: Coeficientes para calcular conductividad térmica [W/m-K]

Viscosidad

Constante	Nitrógeno	10% Helio	20% Helio	28% Helio	40% Helio	60% Helio
μ_{ref}	1.819· 10 ⁻⁵	$1.837 \cdot 10^{-5}$	1.855· 10 ⁻⁵	1.869· 10 ⁻⁵	1.890· 10 ⁻⁵	1.926· 10 ⁻⁵
T _{ref}	300	300	300	300	300	300
S	115	115	115	115	115	115

Tabla 4.4: Constantes de la ley de Sutherland para la Viscosidad [Pa s]

Para calcular las constantes de la función de viscosidad, se escoge arbitrariamente la temperatura $T_{ref} = 300 K$ y luego, a partir de ese valor, se puede determinar que la otra constante de la Ley de Sutherland es S = 115 K para este caso. El código con el que se obtienen estos resultados se muestra en el <u>Anexo C</u>. La <u>Tabla 4.4</u> muestra los valores de las constantes de la Ley de Sutherland que son antes mencionadas en la expresión (3.5), en la <u>Sección 3.4</u> de Mezclas binarias Helio-Nitrógeno.

Es importante remarcar que los **resultados obtenidos son coherentes**. La viscosidad calculada efectivamente se comporta de acuerdo a la Ley de Sutherland para gases ideales, como se puede observar en la Figura 4.17 y más adelante en <u>Anexo D</u>. Nótese también que para el Nitrógeno a baja temperatura (y también baja presión), su calor específico es $C_p \approx 1040 J/kgK$, y este resultado es muy parecido a lo que se obtiene al usar la aproximación para gases diatómico $C_n \approx 3.5 \cdot R$, siendo *R* la constante de gas ideal del Nitrógeno.

Los resultados aquí presentados proveen información que puede ser usada en un futuro para el estudio de otras microtoberas o cualquier otro tipo de proceso que requiera simular el flujo de mezclas binarias Helio-Nitrógeno en un rango similar de presión y temperatura.

A partir de este punto, ya se cuenta con todo lo necesario para incorporar las propiedades de las mezclas Helio-Nitrógeno en la optimización de la geometría de las microtoberas, para luego proceder al modelamiento fluido-dinámico de las mismas.

4.4 Geometrías de microtobera optimizadas

Como se menciona en la <u>Sección 3.5</u> de este informe, las restricciones son: que el número de Mach debe ser menor a 3.5, la temperatura de salida debe ser mayor a 200 K, la relación entre el largo de la microtobera y el diámetro de salida debe ser mayor a 15, el ángulo interno de la sección divergente debe ser mayor a 1°, entre otras restricciones. También, se impone que la temperatura de entrada es 750 K y la presión de entrada es 3.5 MPa. Además se debe definir una presión de salida mínima. Si inicialmente se impone una presión de salida mínima de 0.6 bar, el resultado de la optimización es el que se muestra en la <u>Tabla 4.5</u>.

<i>v_e</i> [m/s]	Helio [%]	L _{div} [mm]	$D_e[\text{mm}]$	D_{cr} [mm]	θ[°]	<i>T_e</i> [K]	P _e [MPa]	
1417.4	60	42	2.8	1.3	1.023	200.05	0.0674	
Tabla 4.5: Configuración microtobera N°1								

•	v_e :	Velocidad a la salida	[m/s]
•	Helio	r: Fracción molar de Helio	[%]
•	L_{div} :	Largo sección divergente	[<i>mm</i>]
•	D_e :	Diámetro de salida	[<i>mm</i>]
•	D _{cr} :	Diámetro de garganta	[<i>mm</i>]
•	$\theta:$	Ángulo interno	[°]
•	T_e :	Temperatura a la salida	[K]
•	P_e :	Presión a la salida	[MPa]

Nótese que cuanto más Helio se añade, mayor velocidad alcanza el gas de trabajo. Entonces es natural preguntarse por qué la configuración óptima no es aquella con 100% Helio. La razón es la restricción de la temperatura de salida. Al aumentar el porcentaje de Helio, aumenta el valor del coeficiente de dilatación isentrópica γ , y de acuerdo a la expresión (2.2.1), ello también significa que baja la temperatura, se reduce la temperatura a la salida de la microtobera. Así entonces, para el dominio evaluado y bajo las restricciones del problema, la configuración óptima solo contempla una fracción molar de Helio de 60%.

Si se resuelve el mismo problema de optimización pero imponiendo una presión mínima más estricta de 0.8 bar, el resultado es el que se muestra en la <u>Tabla 4.6</u>.

<i>v_e</i> [m/s]	Helio [%]	L _{div} [mm]	$D_e[\text{mm}]$	$D_{cr}[mm]$	θ [°]	<i>T_e</i> [°K]	P _e [MPa]
1153.3	28	45	3	1.4	1.0185	244.65	0.0803
			< a a				

1 abla 4.6: Configuration microtobera N [*]	Fabla 4.6:	Config	uración	micro	otobera	N°2
---	------------	--------	---------	-------	---------	-----

En este caso, la restricción de presión es la que limita la capacidad de añadir más Helio. De la expresión (2.2.2) se puede notar que al añadir Helio, aumenta el coeficiente de dilatación isentrópica γ , lo que se traduce en una disminución de la presión de salida.

Ya se tienen dos configuraciones de microtobera óptimas, una donde la presión de salida no se considera relevante y se admite una presión mínima de 0.6 bar y otra donde se quiere que el flujo sea lo menos sobre-expandido posible y se admite una presión mínima de 0.8 bar. Para cada caso, se tiene un porcentaje óptimo de Helio de 60% y 28% respectivamente.

La idea de este trabajo de título es evaluar la posibilidad de reducir el porcentaje de Helio cuanto sea posible. Por esta razón, se evalúan casos intermedios entre estos óptimos y el uso de Nitrógeno puro. Entonces, para microtoberas cuya presión mínima es 0.6 bar, se evalúan los casos con 40%, 20% y 0% Helio. Para las microtoberas cuya presión mínima es 0.8 bar, se evalúan los casos con 20%, 10% y 0% Helio. Todo esto da un total de <u>ocho configuraciones diferentes</u>. El resumen con el resultado de las ocho optimizaciones se muestra en la <u>Tabla 4.7</u>. La primera columna de la tabla muestra la forma en que se enumera cada configuración y la forma en que cada una de estas microtoberas es referida en este informe.

Tobera N°	<i>v_e</i> [m/s]	Helio [%]	L_{div} [mm]	$D_e[\text{mm}]$	D_{cr} [mm]	θ [°]	<i>T_e</i> [°K]	P _e [MPa]
1	1417.4	60	42	2.8	1.3	1.0230	200.05	0.0674
2	1153.3	28	45	3.0	1.4	1.0185	244.65	0.0803
3	1251.4	40	48	3.0	1.3	1.0145	212.86	0.0601
4	1111.7	20	40	2.6	1.2	1.0026	252.10	0.0801
5	1132.7	20	42	2.6	1.1	1.0230	233.10	0.0611
6	1064.9	10	37	2.4	1.1	1.0064	262.37	0.0813
7	1046.1	0	48	2.9	1.2	1.0145	251.62	0.0616
8	1022.7	0	37	2.4	1.1	1.0064	273.71	0.0841

Tabla 4.7: Resumen de resultados de las ocho configuración optimizadas

Estas ocho configuraciones son las que se modelan por medio del programa Ansys FLUENT para así obtener las velocidades y temperaturas de impacto de las partículas, y con eso definir la eficiencia de depósito de Cobre que puede alcanzar cada una de estas microtoberas.

El código en Matlab utilizado para llevar a cabo la optimización se muestra en el Anexo E.

4.5 Resultados de simulaciones fluido-dinámicas

4.5.1 Microtobera N°1

La Microtobera N°1 es la referida con esa numeración en la <u>Tabla 4.7</u>, con 42 mm de largo (sección divergente), 1.3 mm de diámetro de garganta y 2.8 mm de diámetro de salida. El gas de trabajo es 60% Helio (fracción molar).

El campo de velocidades de la Microtobera N°1 se muestra en la Figura 4.21.



El campo de temperaturas de la Microtobera N°1 se muestra en la Figura 4.22.



En cuanto a las partículas de Cobre, el primer caso evaluado son las partículas de 5 μm . Éstas son las más pequeñas y por lo tanto pueden alcanzar velocidades más altas, pero también son más susceptibles a los efectos de la turbulencia. Tanto para su velocidad como para la temperatura.

La <u>Figura 4.23</u> muestra cómo varía la velocidad de estas partículas en función de la distancia recorrida a través de la microtobera y la región de *free jet*. Incluyendo la dispersión por turbulencia. Recordar que se asume que las partículas son liberadas desde la garganta de la microtobera.

Recordar que las partículas se modelan individualmente y <u>no</u> como un flujo. Las partículas se modelan individualmente pero en "paquetes" de 100. Es decir, se modelan 100 partículas idénticas bajo las mismas condiciones de operaciones. La <u>dispersión de datos</u> es resultado del modelo estocástico que afecta al campo de velocidades del gas que interactúa con las partículas.



Figura 4.23: Velocidad de partículas de 5 um para Microtobera N°1

En cuanto a la temperatura de las partículas, la <u>Figura 4.24</u> muestra cómo ésta varía a lo largo de la trayectoria de la partícula. Asumiendo que las partículas son liberadas en la garganta a temperatura ambiente (300 K).



Figura 4.24: Temperatura de partículas de 5 um para Microtobera N°1 (Ingreso a 300 K)

Luego, si las partículas ingresan a la temperatura de garganta (640 K), entonces, la temperatura de las partículas a lo largo de la trayectoria se muestra en la <u>Figura 4.25</u>.



Figura 4.25: Temperatura de partículas de 5 um para Microtobera N°1 (Ingreso a 640 K)

Se puede observar que a pesar de que las partículas son precalentadas, su temperatura baja drásticamente a lo largo de la trayectoria. Alcanzando temperaturas del orden de 320 K, similares a las temperaturas del caso cuando las partículas ingresan a temperatura ambiente. Esto se debe a que las partículas pequeñas menores a $15 \,\mu m$ no tienen suficiente "inercia térmica" y su temperatura se ve muy afectada por las condiciones instantáneas del flujo de gas.

"<u>Inercia térmica</u>" en la jerga de *Cold Spray* se refiere a cuán capaz es una partícula para mantener su propia temperatura ante las variaciones de la temperatura del gas de trabajo por el que transita, por lo tanto no se refiere a una magnitud física. Se dice entonces que las partículas pequeñas tienen poca "inercia térmica", mientras que las más grandes tienen mayor "inercia".

El segundo caso son las partículas de $10 \mu m$. Éstas también pueden ser consideradas partículas pequeñas, lo que significa que alcanzan altas velocidades y tienen poca "inercia térmica". La velocidad de estas partículas a lo largo de la trayectoria se muestra en la Figura 4.26.



Figura 4.26: Velocidad de partículas de 10 um para Microtobera Nº1

En cuanto a la temperatura, el caso cuando las partículas ingresan a temperatura ambiente se muestra en la <u>Figura 4.27</u>. En tanto que el caso cuando las partículas ingresan a la temperatura de garganta se muestra en la <u>Figura 4.28</u>.



Figura 4.27: Temperatura de partículas de 10 um para Microtobera N°1 (Ingreso a 300 K)



Figura 4.28: Temperatura de partículas de 10 um para Microtobera N°1 (Ingreso a 640 K)

En este caso se observa que las partículas sin precalentar (ingreso a temperatura ambiente) alcanzan temperaturas del orden de 350 K, mientras que las partículas precalentadas alcanzan temperaturas del orden de 375 K. Nuevamente se observa la baja "inercia térmica" de las partículas pequeñas y el poco efecto del precalentado en la temperatura final.

El tercer caso son las partículas de 15 μm . En este caso, la diferencia de temperaturas entre las partículas sin precalentar y las precalentadas se nota, lo que significa que en este punto las partículas ya tienen cierta "inercia térmica". En cuanto a las velocidades, éstas aún son velocidades sobre los 600 m/s, por lo que pueden seguir siendo consideradas velocidades altas.

Las gráficas de velocidad, temperatura con ingreso a 300 K y temperatura con ingreso a 640 K se muestran en las <u>Figura 4.29</u>, <u>Figura 4.30</u> y <u>Figura 4.31</u> respectivamente.



Figura 4.29: Velocidad de partículas de 15 um para Microtobera N°1



Figura 4.30: Temperatura de partículas de 15 um para Microtobera N°1 (Ingreso a 300 K)



Figura 4.31: Temperatura de partículas de 15 um para Microtobera N°1 (Ingreso a 640 K)

Para las partículas de 20 μ m, la velocidad baja el umbral de los 600 m/s, por lo que no son consideradas partículas veloces. A partir de este punto ya se nota marcadamente la "inercia térmica". La <u>Figura 4.32</u>, <u>Figura 4.33</u> y <u>Figura 4.34</u> muestran la velocidad de estas partículas, temperatura con ingreso a 300 K y temperatura con ingreso a 640 K respectivamente.



Figura 4.32: Velocidad de partículas de 20 um para Microtobera N°1



Figura 4.33: Temperatura de partículas de 20 um para Microtobera N°1 (Ingreso a 300 K)



Figura 4.34: Temperatura de partículas de 20 um para Microtobera N°1 (Ingreso a 640 K)

El quinto caso son las partículas de $25 \,\mu m$. La velocidad bordea los 550 m/s y las temperaturas finales 350 y 510 K para cada caso. La Figura 4.35, Figura 4.36 y Figura 4.37 muestran la velocidad, temperatura con ingreso a 300 K y temperatura con ingreso a 640 K, respectivamente.



Figura 4.35: Velocidad de partículas de 25 um para Microtobera N°1



Figura 4.36: Temperatura de partículas de 25 um para Microtobera N°1 (Ingreso a 300 K)



Figura 4.37: Temperatura de partículas de 25 um para Microtobera N°1 (Ingreso a 640 K)

El sexto caso son las partículas de 30 μm , cuya velocidad media se acerca a los 500 m/s. Ésta suele ser la velocidad crítica media de adhesión de las partículas de Cobre, en la mayoría de los casos. La <u>Figura 4.38</u>, <u>Figura 4.39</u> y <u>Figura 4.40</u> muestran la velocidad, temperatura con ingreso a 300 K y temperatura con ingreso a 640 K, respectivamente.


Figura 4.38: Velocidad de partículas de 30 um para Microtobera N°1



Figura 4.39: Temperatura de partículas de 30 um para Microtobera N°1 (Ingreso a 300 K)



Figura 4.40: Temperatura de partículas de 30 um para Microtobera N°1 (Ingreso a 640 K)

El séptimo caso son las partículas de 35 μm , con una velocidad media en torno a 480 m/s, lo que puede ser considerado baja velocidad. La <u>Figura 4.41</u>, <u>Figura 4.42</u> y <u>Figura 4.43</u> muestran la velocidad de las partículas, temperatura con ingreso a 300 K y temperatura con ingreso a 640 K, respectivamente.



Figura 4.41: Velocidad de partículas de 35 um para Microtobera N°1



Figura 4.42: Temperatura de partículas de 35 um para Microtobera N°1 (Ingreso a 300 K)



Figura 4.43: Temperatura de partículas de 35 um para Microtobera N°1 (Ingreso a 640 K)

El penúltimo caso son las partículas de 40 μm , cuya velocidad es alrededor de 450 m/s, lo cual es muy bajo. Idealmente, todas las partículas deberían alcanzar velocidades sobre los 500 m/s. La <u>Figura 4.44</u>, <u>Figura 4.45</u>, <u>Figura 4.46</u> muestran la velocidad, temperatura con ingreso a 300 K y temperatura con ingreso a 640 K, respectivamente.



Figura 4.44: Velocidad de partículas de 40 um para Microtobera N°1



Figura 4.45: Temperatura de partículas de 40 um para Microtobera N°1 (Ingreso a 300 K)



Figura 4.46: Temperatura de partículas de 40 um para Microtobera N°1 (Ingreso a 640 K)

Dado que para polvo de Cobre comercial, las partículas no exceden los 50 μm , el último caso en estudio son las partículas de 45 μm . La Figura 4.47, Figura 4.48 y Figura 4.49 muestran la velocidad, temperatura con ingreso a 300 K y temperatura con ingreso a 640 K, respectivamente.



Figura 4.47: Velocidad de partículas de 45 um para Microtobera N°1



Figura 4.48: Temperatura de partículas de 45 um para Microtobera N°1 (Ingreso a 300 K)



Figura 4.49: Temperatura de partículas de 45 um para Microtobera N°1 (Ingreso a 640 K)

Una vez que se tienen todos estos datos, se define una distancia desde la salida de la microtobera a la cual se mide la velocidad y temperatura de impacto. La distancia escogida para ésta y todas las microtoberas en este informe es 15 mm.

Queda procesar los datos. Estos son extraídos manualmente desde el programa Ansys FLUENT en formato *.xy* y procesados en Matlab para generar la <u>Figura 4.50</u> y <u>Figura 4.51</u> que se muestran a continuación. Estas figuras representan la velocidad de impacto y la temperatura de impacto, respectivamente, cuando las partículas ingresan a 300 K. También se contrasta la velocidad de impacto con la <u>velocidad crítica</u>, y se determina una <u>eficiencia de depósito</u>.

La <u>dispersión de datos</u> corresponde a 100 partículas idénticas modeladas bajo las mismas condiciones de operación pero sometidas a un flujo turbulento producto del modelo estocástico. Los valores marcados con círculos corresponden a valores promedio de la velocidad o temperatura de impacto, mientras que los valores a los extremos <u>no corresponden a un error</u>, sino a valores máximos y mínimos obtenidos al procesar el total de las 100 partículas modeladas para cada caso.



Figura 4.50: Velocidad de Impacto y Eficiencia con ingreso a 300 K para la Microtobera Nº1

Los códigos para llegar a obtener la <u>Figura 4.50</u>, <u>Figura 4.51</u> y otras gráficas similares, pueden ser consultados en el <u>Anexo F</u> del presente informe. Es importante señalar que debido a la discretización del problema, al número de variables y al número de partículas simuladas, en estas gráficas <u>se analizan alrededor de 19 millones de datos</u>, por lo que su obtención no es sencilla



Figura 4.51: Temperatura de Impacto con ingreso a 300 K para la Microtobera Nº1

Para ambas gráficas, los valores de los extremos representan máximos y mínimos, mientras que los valores en círculos son promedios del muestreo de datos.

Este resultado es muy interesante y significa que aun cuando no exista precalentado de las partículas, utilizando una mezcla con 60% Helio, desde un punto de vista teórico, puede depositar Cobre con una eficiencia de 90% (el 90% de la masa del polvo comercial se deposita en el proceso).

Ahora queda ver el caso en el que las partículas son precalentadas hasta 640 K. Este es un caso extremo y no común en la industria, lo más común es que las partículas entren a temperatura ambiente. Sin embargo, es factibles que las partículas sean calentadas hasta esa temperatura y que se mantengan a esa temperatura si la aguja de inyección es calentada al entrar en contacto con el gas que pasa a través de la garganta. Por esto se evalúa este caso, para así imponer una cota máxima de depósito factible. La Figura 4.52 y Figura 4.53 muestran la velocidad de impacto y temperatura de impacto, respectivamente, cuando las partículas ingresan a 640 K.



Figura 4.52: Velocidad de Impacto y Eficiencia con ingreso a 640 K para la Microtobera Nº1



Figura 4.53: Temperatura de Impacto con ingreso a 640 K para la Microtobera N°1

Con este resultado se tiene que desde un punto de vista teórico, es factible obtener una eficiencia de depósito desde 90% (cuando las partículas ingresan a temperatura ambiente) hasta 100% (cuando las partículas ingresan a la temperatura de garganta). Sobre 90% de eficiencia está muy por sobre el estándar en la industria en donde se considera que el proceso de *Cold Spray* como factible cuando se obtiene una <u>eficiencia de depósito</u> del orden de 35%, 40% o 50% según los requerimientos específicos del usuario.

Es decir, para microtoberas cuyo largo sea 42 mm o más, utilizar un gas de trabajo con un <u>60% Helio es suficiente para obtener un gran rendimiento</u> en el proceso de *Cold Spray* para Cobre.

4.5.2 Resumen de Resultados

El mismo procedimiento mostrado en la <u>Sección 4.5.1</u> para la Microtobera N°1 puede ser repetido para todas las microtoberas seleccionadas que aparecen en la <u>Tabla 4.7</u>. Para que la presentación de resultados sea menos tediosa y repetitiva, a continuación se muestra un resumen de los resultados para todas las microtoberas evaluadas. El detalle de los resultados de velocidades y temperaturas de impacto y eficiencia de depósito para cada tobera se muestran en el <u>Anexo G</u>.

La <u>Tabla 4.8</u> resume los resultados obtenidos en las ocho simulaciones. El subíndice "e" indica *exit* (a la salida de la tobera), aunque los datos fueron tomados a una distancia desde la salida de la tobera equivalente al largo del diámetro de salida.

Tobera N°	Helio [%]	L_{div} [mm]	$D_e[\text{mm}]$	D_{cr} [mm]	$v_e \text{ [m/s]}$	T_e [K]	Efic. Mín	Efic. Máx
							[%]	[%]
1	60	42	2.8	1.3	1386.27	197.542	90.00	100.0
2	28	45	3.0	1.4	1128.71	240.923	74.23	100.0
3	40	48	3.0	1.3	1215.20	213.860	85.60	100.0
4	20	40	2.6	1.2	1090.15	252.163	40.50	83.96
5	20	42	2.6	1.1	1091.74	235.207	46.88	88.61
6	10	37	2.4	1.1	1053.29	263.103	27.58	64.45
7	0	48	2.9	1.2	1015.25	248.629	39.54	89.54
8	0	37	2.4	1.1	1004.45	270.125	15.39	56.03

Tabla 4.8: Tabla Resumen de resultados de las ocho configuraciones de microtobera

•	Helio	e: Fracción molar de Helio	[%]
•	L_{div} :	Largo sección divergente	[mm]
•	D_e :	Diámetro de salida	[mm]
•	D _{cr} :	Diámetro de garganta	[mm]
•	v_e :	Velocidad a la salida	[m/s]
•	T_e :	Temperatura a la salida	[K]
•	P_e :	Presión a la salida	[MPa]
•	Efic.	Mín: Eficiencia de depósito mínima	[%]
•	Efic.	Máx: Eficiencia de depósito máxima	[%]

Eficiencia mínima es aquella evaluada con las partículas ingresando a 300 K (temperatura ambiente). La eficiencia máxima es aquella evaluada con las partículas ingresando a 640 K (temperatura de garganta). Se consideran estas temperaturas como la mínima y máxima admisible.

En el siguiente capítulo se procede al análisis de resultados y a las conclusiones extraídas de este trabajo de investigación.

Capítulo 5 Análisis de Resultados y Conclusiones

5.1 Análisis de Resultados

Debido a que el Cobre es un metal pesado, en comparación a otros como el Titanio y el Aluminio, se tiene que sus partículas alcanzan velocidades más bajas durante el proceso de *Cold Spray*, lo que produce que gran parte de las partículas no se adhieran en el proceso.

Por otra parte, al utilizar Nitrógeno se obtienen velocidades del gas de trabajo mucho más bajas que al utilizar Helio. De allí la dificultad de diseñar microtoberas que operen con Nitrógeno y que sean capaces de depositar Cobre.

De los resultados obtenidos en la <u>Tabla 4.8</u> se deduce que las principales variables que determinar la <u>eficiencia de depósito</u> del proceso son <u>la velocidad del gas</u> y <u>el largo de la tobera</u>. Respecto a esto último, en la misma <u>Tabla 4.8</u>, se puede ver que la eficiencia de depósito de la Microtobera N°7 (que opera con Nitrógeno puro) es de un <u>39%</u>, lo que está en el límite de factibilidad del proceso. Esto quiere decir que este trabajo impone un límite teórico para el largo mínimo que pueden tener las microtoberas de *Cold Spray* para Cobre que operen con Nitrógeno puro. Una microtobera bajo estas condiciones <u>no puede tener un largo menor a 48 mm</u>. Este es un hallazgo del que no existía previo conocimiento.

Este largo de 48 mm es bastante, considerado que el objetivo de diseñar estas microtoberas es hacer factible, en un futuro próximo, la impresión 3D de Cobre en alta resolución. Este resultado también plantea nuevos retos, como por ejemplo, estudiar más en detalle las limitaciones en cuanto al número de Mach máximo admisible o evaluar cómo reducir el diámetro de salida de las microtoberas manteniendo este largo de 48 mm, lo que implica reducir el ángulo interno de las mismas a tan solo 0.4°, si se desea un diámetro de salida del orden de 1.2 mm. Esto plantea un **nuevo desafío para la manufactura de estos elementos**.

En definitiva, desde un punto de vista teórico, es factible el uso de microtoberas que operen con Nitrógeno para depositar Cobre, pero aún existen dificultades que deben ser abordadas.

El efecto de la inclusión de Helio en el proceso es muy significativo. Al comparar la misma <u>Microtobera N°7</u> recién analizada con los resultados de la <u>Microtobera N°3</u> que tiene el mismo largo de 48 mm pero utiliza una mezcla 40% Helio, se tiene que, en condiciones normales de operación (ingreso de las partículas a 300 K), la <u>eficiencia de depósito</u> de esta tobera es un 85%, comparado con el 39% que logra la Microtobera N°7 que solo utiliza Nitrógeno puro.

Por esta razón surge el uso de mezclas binarias Helio-Nitrógeno como una alternativa a los malos resultados del uso de Nitrógeno puro y al alto costo del Helio puro. Este trabajo plantea que, en adelante, <u>el porcentaje de Helio del gas de trabajo debe ser un parámetro de diseño</u> de las microtoberas y no simplemente limitarse al uso de gases puros como ocurre en la actualidad.

Más aún, este trabajo también propone que <u>el uso de Helio puro puede resultar ineficiente</u> en algunos casos. La eficiencia de depósito que obtiene la Microtobera N°1 es de un 90% sin precalentado (ingreso de las partículas a 300 K) utilizando una mezcla con 60% Helio. Esto sugiere que existe una mezcla con porcentaje de Helio mayor a 60% y menor a 100% que permite alcanzar una <u>eficiencia de depósito teórica</u> de un 100% para el proceso. De ser así, el uso de Helio puro es ineficiente desde la perspectiva de los <u>costos operacionales</u>, pues no es estrictamente necesario el uso del gas puro para alcanzar la eficiencia máxima posible. Nótese que para este análisis, se contempla la posibilidad de que las toberas puedan cumplir con otras condiciones de diseño diferentes a las planteadas en esta investigación, puesto que bajo las restricciones de diseño impuestas para este trabajo, no es posible utilizar una mezcla con más de un 60% Helio, pues se incumple la restricción de la temperatura de salida mínima.

Retomando esta idea de la eficiencia máxima posible. Es interesante notar que bajo las restricciones de diseño que se imponen en este trabajo, <u>no existe microtobera capaz de alcanzar una eficiencia de depósito de un 100% sin precalentado</u>. Aquí entonces <u>aparece el precalentado</u> <u>de las partículas como una alternativa para incrementar la eficiencia de depósito</u> del proceso. Al precalentar las partículas a la máxima temperatura admisible, que es la temperatura del gas en la garganta, aparecen tres microtoberas con una eficiencia de depósito de un 100%. Este resultado es muy interesante, pues plantea la posibilidad de que en un futuro próximo se estudie el efecto real del precalentado de las partículas en la mejora del desempeño de las microtoberas y se diseñen dispositivos que permitan el precalentado de las partículas para el proceso.

Otro aspecto interesante del precalentado es que únicamente conlleva a un costo energético, a diferencia del consumo de Helio, que es un <u>recurso no-renovable</u>. Sin embargo, el precalentado de las partículas también propicia la formación de óxido en metales como Aluminio, Titanio y Cobre, lo que es perjudicial para el proceso. Por esto, también es imprescindible que en un futuro las microtoberas puedan operar en sistemas cerrados, limpios de oxígeno, para que sea viable el uso del precalentado de partículas y así mejorar el desempeño de las microtoberas.

En resumidas cuentas, a partir de este trabajo se establece que:

- 1- El uso de microtoberas de *Cold Spray* para Cobre, con Nitrógeno como gas de trabajo, es factible desde un punto de vista teórico solo si el largo de la microtobera es mayor a 48mm y si las partículas son precalentadas. En cualquier caso, el rango de eficiencia del proceso varía entre 39% y 89%, acercándose a la cota mínima en condiciones reales.
- 2- Si se desea diseñar microtoberas de alta eficiencia con un diámetro de salida de 1.2 mm, se requiere que el ángulo interno admisible se reduzca a 0.4° grados.
- 3- Solo se puede obtener alta eficiencia de depósito sin precalentado si el gas de trabajo tiene al menos un 28% Helio.
- 4- Para gases de trabajo ricos en Helio (entre 28% y 60%) se puede obtener alta eficiencia de depósito si el largo de la microtobera está en un rango entre 42 mm y 48 mm.
- 5- La temperatura de ingreso de las partículas incide fuertemente en la temperatura de impacto de las mismas y por ende en la velocidad crítica. Aumentando la temperatura de ingreso al extremo de 640 K se tiene un incremento en la eficiencia del orden de 40%. Aunque calentar las partículas hasta esta temperatura no es factible, es un indicio de la importancia que tiene incluir <u>el precalentado de las partículas</u> como una variable de diseño para evaluar condiciones intermedias entre los 300 K y los 640 K.
- 6- <u>El largo de la microtobera</u> incide fuertemente en la velocidad de impacto de las partículas, y por lo tanto esta variable no puede ser excluida en el diseño (ni en la optimización) de las microtoberas. Se hace muy necesario contar con una formula simplificada o un *software* dedicado que pueda simular la velocidad y temperatura de impacto de las partículas con menor tiempo y gasto computacional. Este punto es clave para continuar el desarrollo de esta tecnología y la búsqueda de microtoberas más eficientes.

5.2 Conclusiones

Se cumplió exitosamente con los objetivos planteados. El modelamiento CFD ha resultado ser una herramienta válida para el diseño de microtoberas capaces de depositar partículas de Cobre.

Se validó exitosamente un modelo pre-existente para el estudio del flujo de gas y el arrastre de partículas en microtoberas. En particular, se validó el trabajo del paper "*Deposition of Aluminum Powder by Cold Spray Micronozzle*" escrito por Alexey Sova y otros autores [9].

Se logró la caracterización de las propiedades termodinámicas de las mezclas binarias Helio-Nitrógeno como función de la temperatura. Al caracterizar estas propiedades bajo el supuesto de expansión isentrópica y en un rango entre 200 K y 700 K, queda abierta la posibilidad del uso de los resultados obtenidos para la simulación de otras toberas de *Cold Spray* que requieran incorporar mezclas Helio-Nitrógeno en el proceso.

Se logró la selección de ocho microtoberas diferentes utilizando como criterio la maximización de la velocidad del gas de trabajo. Aunque ésta es una simplificación del problema, lo cierto es que se pueden diseñar microtoberas de buen desempeño utilizando únicamente este criterio. Cabe señalar que esta optimización no es fácil de implementar, y por "simplificación" se refiere a la reducción de las variables consideradas para el problema de optimización.

Se hizo uso del modelo pre-existente con dos modificaciones necesarias para implementarlo en la resolución del problema planteado en este trabajo. En primer lugar, en vez de Helio puro, se incorporaron mezclas Helio-Nitrógeno, y luego, y en vez de Aluminio, se modelaron partículas de Cobre. En este sentido, las simulaciones lograron ser exitosas, pues no se presentaron errores al incorporar las propiedades de las mezclas Helio-Nitrógeno antes calculadas, y se logró describir el flujo de gas a través de las microtobera.

Se modeló el arrastre de las partículas utilizando la aproximación de Henderson y el modelo estocástico DRW. Como consecuencia de este último, se generó una base de datos enorme con más de 19 millones de elementos. En este sentido, se logró exitosamente la implementación de un código en Matlab capaz de procesar estos datos y extraer las velocidades y temperaturas de impacto de las partículas que son de interés para este trabajo.

Se estimó la <u>eficiencia de depósito</u> utilizando el criterio de <u>velocidad crítica</u> mencionado en la parte de Antecedentes de este informe. Aunque se espera en un futuro que los resultados sean validados experimentalmente, se puede decir con propiedad que los resultados son coherentes en el sentido que conforme aumenta la velocidad del gas de trabajo, también aumenta la eficiencia de depósito calculada para el proceso. Del análisis de estos resultados se extraen conclusiones valiosas, como que el precalentado de las partículas sí tiene una incidencia importante en la mejora del proceso y que el uso de mezclas Helio-Nitrógeno puede resultar incluso más conveniente que el eso de Helio puro, además de resolver los problemas que plantea el uso del Nitrógeno puro.

Este trabajo ha resultado muy interesante pues en un principio no se tenía claridad de cuan factible o bajo qué condiciones era posible utilizar Nitrógeno para operar microtoberas de *Cold Spray* para Cobre. Ante esta situación se considera la idea de trabajar con mezclas Helio-Nitrógeno, lo añade una dificultad extra al modelo pero al mismo tiempo genera implicancias mayores.

La implicancia principal de este trabajo es que a partir de ahora el porcentaje de Helio es una variable de diseño, que puede ser calculada y modelada. Esto significa que se puede evaluar si ciertas microtobera realmente requieren utilizar Helio puro o en su lugar pueden utilizar una mezcla binaria Helio-Nitrógeno que va a conllevar a la reducción de costos operacionales, lo que va en directo beneficio para mejorar el acceso a esta tecnología.

En este trabajo también se establece que para la depositación de Cobre y utilizando Nitrógeno como gas de trabajo, hay un largo mínimo admisible (48 mm). Esto condiciona significativamente el diseño de microtoberas en base a Nitrógeno en el futuro, pues los esfuerzos en adelante deben enfocarse a reducir el ángulo interno, y en lograr mantener las partículas a alta temperatura antes del ingreso a la microtobera, para mejorar el rendimiento del proceso.

La simplificación utilizada para obtener los resultados de este trabajo es que la geometría de las microtoberas fue optimizada maximizando la velocidad de salida del gas de trabajo. Si bien se demuestra que con este procedimiento se obtienen buenos resultados y conclusiones fuertes en cuando al proceso de *Cold Spray*, también se deduce de este trabajo que el largo de la tobera, y en particular la velocidad y temperatura de impacto de las partículas no pueden ser ignoradas al momento de optimizar la geometría de una tobera.

El gran inconveniente para incluir estas variables en la optimización de las microtoberas es que el modelamiento fluido-dinámico de las mismas requiere de un gran gasto computacional, puesto que las simulaciones deben hacerse en modo transiente por la generación de vórtices en fases iniciales del flujo. No obstante, aunque fuese posible realizar una simulación estacionaria, esto no es suficiente pues en un proceso de optimización se debe evaluar un gran número de geometrías diferentes, lo que también es otra de las limitantes.

Este trabajo provee un procedimiento que permite obtener buenos resultados y que logra con creces los objetivos planteados. Sin embargo, también es importante señalar que el desarrollo de *softwares* dedicados, tecnologías del tipo *real-time simulation* u otras alternativas como algoritmos genéticos o incluso redes neuronales serán claves para reducir los tiempos computacionales y simplificar el modelamiento y la optimización de las microtoberas de *Cold Spray*, lo que es fundamental para el desarrollo de esta tecnología en el futuro.

A modo personal, existe total conformidad con el trabajo realizado, con los logros alcanzados y con el aprendizaje obtenido durante el desarrollo de este trabajo de título.

Bibliografía

- [1] S. Yin *et al.*, "Cold spray additive manufacturing and repair: Fundamentals and applications," *Addit. Manuf.*, vol. 21, no. August 2017, p. 629, 2018.
- [2] CSIRO, "Cold spray: accelerating additive manufacturing." [Online]. Available: https://vimeo.com/234771757. [Accessed: 08-Jan-2019].
- [3] Comunicaciones Dimec, "DIMEC impulsa el desarrollo de la manufactura avanzada en el país," 2018. [Online]. Available: http://ingenieria.uchile.cl/noticias/149540/dimec-impulsa-desarrollo-de-la-manufactura-avanzada-en-el-pais. [Accessed: 08-Jan-2019].
- [4] A. Hamweendo and Ionel Botef, "Method of Manufacturing an Object with Microchannels provided therethrough," US20170250122A1, 2017.
- [5] A. Papyrin, "Cold Spray Technology," *Adv. Mater. Process.*, no. September, pp. 49–51, 2001.
- [6] NGK Insulators, "Coating Technology Processes." [Online]. Available: https://www.ngk-insulators.com/en/product/industrial/fireproof/coating_skills/index.html. [Accessed: 07-Jan-2019].
- [7] R. Fernández, D. MacDonald, A. Nastić, B. Jodoin, A. Tieu, and M. Vijay, "Enhancement and Prediction of Adhesion Strength of Copper Cold Spray Coatings on Steel Substrates for Nuclear Fuel Repository," *J. Therm. Spray Technol.*, vol. 25, no. 8, pp. 1577–1587, 2016.
- [8] Moog Inc., "Cold Spray Repair." pp. 1–8, 2016.
- [9] A. Sova, I. Smurov, M. Doubenskaia, and P. Petrovskiy, "Deposition of aluminum powder by cold spray micronozzle," *Int. J. Adv. Manuf. Technol.*, vol. 95, no. 9–12, pp. 3745– 3752, 2018.
- [10] H. Assadi *et al.*, "On parameter selection in cold spraying," *J. Therm. Spray Technol.*, vol. 20, no. 6, pp. 1161–1176, 2011.
- [11] A. Sova, S. Klinkov, V. Kosarev, N. Ryashin, and I. Smurov, "Preliminary study on deposition of aluminium and copper powders by cold spray micronozzle using helium," *Surf. Coatings Technol.*, vol. 220, pp. 98–101, 2013.
- [12] A. Sova, A. Okunkova, S. Grigoriev, and I. Smurov, "Velocity of the particles accelerated by a cold spray micronozzle: Experimental measurements and numerical simulation," *J. Therm. Spray Technol.*, vol. 22, no. 1, pp. 75–80, 2013.
- [13] "Cold Gas Dynamic Spray Coatings." [Online]. Available: http://www.tessonics.com/products-cold-spray.html. [Accessed: 15-Dec-2018].
- [14] Fluent Inc, "Section 10 Modeling Turbulence," in *Fluent 6.1 User's Guide*, no. February, 2003.
- [15] F. G. Schmitt, "About Boussinesq's turbulent viscosity hypothesis: historical remarks and a direct evaluation of its validity," *Comptes Rendus - Mec.*, vol. 335, no. 9–10, pp. 617– 627, 2007.

- [16] Ansys Inc., "Section 28 Using the Solver," in *ANSYS Fluent User* 's *Guide*, vol. 15, no. November, 2013.
- [17] Ansys Inc., "Least Squares Cell-Based Gradient Evaluation," in *ANSYS FLUENT Theory Guide*, vol. 15.0, no. November, 2013, pp. 643–644.
- [18] B. E. Launder and D. B. Spalding, "THE NUMERICAL COMPUTATION OF TURBULENT FLOWS," *Comput. Methods Appl. Mech. Eng.*, vol. 3, no. 1974, pp. 269– 289, 1974.
- [19] Ansys Inc., "Near-Wall Treatments for Wall-Bounded Turbulent Flows," in *ANSYS FLUENT Theory Guide*, vol. 15.0, no. November, 2013, pp. 112–127.
- [20] Jayatilleke C., "The influence of Prandtl Number and Surface Roughness on the Resistance of the Laminar Sub-layer to Momentum and Heat Transfer," *Imp. Coll. Sci. Technol.*, 1966.
- [21] Van Driest E. R., "On Turbulent Flow Near a Wall," *J. Aeronaut. Sci.*, vol. 23, no. 11, pp. 1007–1011, 1956.
- [22] Ansys Inc., "Treatment of Compressibility Effects," in *ANSYS CFX Solver Theory Guide*, vol. 12.1, no. November, 2009, pp. 43–44 & 95–97.
- [23] A. Lieberman, "Comparison of Predicted and Experimental Wall Temperatures for a Cylindrical Ejector Exhaust Nozzle Operated with Turbojet Gas Generator," *Nasa Technical Note TN D-6465*, no. August. 1971.
- [24] Ansys Inc., "Hybrid Initialization," in ANSYS FLUENT Theory Guide 15.0, 2013, pp. 683–684.
- [25] C. B. Henderson, "Drag Coefficients of Spheres in Continuum and Rarefied Flows," *AIAA J.*, vol. 14, no. 6, pp. 707–708, 1976.
- [26] Ansys Inc., "High-Mach-Number Drag Law," in ANSYS FLUENT Theory Guide 15.0, 2013, p. 386.
- [27] A. Aissa, M. Abdelouahab, A. Noureddine, M. El Ganaoui, and B. Pateyron, "Ranz and marshall correlations limits on heat flow between a sphere and its surrounding gas at high temperature," *Therm. Sci.*, vol. 19, no. 5, pp. 1521–1528, 2015.
- [28] Ansys Inc., "The Discrete Random Walk Model," in *ANSYS FLUENT Theory Guide 15.0*, 2013, pp. 378–379.
- [29] R. J. Adrian, K. T. Christensen, and Z. C. Liu, "Analysis and interpretation of instantaneous turbulent velocity fields," *Exp. Fluids*, vol. 29, pp. 275–290, 2000.
- [30] P. Spalart and S. Allmaras, "A one-equation turbulence model for recirculating flows," *La Rech. Aérospatiale*, no. 1, pp. 5–21, 1994.
- [31] A. Haider and O. Levenspiel, "Drag Coefficient and Terminal Velocity of Spherical and Nonspherical Particles," vol. 58, pp. 63–70, 1989.
- [32] P. G. Peterson and L. M. Kushner, *Thermophysical Properties of Helium-4 from 2 to 1500 K with Pressures to 1000 Atmospheres*, no. November. 1972.
- [33] B. Wischnewski, "Peace Software Calculation of thermodynamic state variables of nitrogen." [Online]. Available: http://www.peacesoftware.de/einigewerte/stickstoff_e.html. [Accessed: 20-Nov-2018].
- [34] J.-M. Tournier and M. S. El-Genk, "Properties of Helium, Nitrogen and He-N2 Binary Gas Mixtures," *J. Thermophys. Heat Transf.*, no. July, pp. 1–15, 2008.
- [35] J. J. Park *et al.*, "Supersonic nozzle flow simulations for particle coating applications: Effects of shockwaves, nozzle geometry, ambient pressure, and substrate location upon flow characteristics," *J. Therm. Spray Technol.*, vol. 20, no. 3, p. 517, 2011.

- [36] T. Schmidt *et al.*, "From particle acceleration to impact and bonding in cold spraying," *J. Therm. Spray Technol.*, vol. 18, no. 5–6, pp. 794–808, 2009.
- [37] B. Jodoin, "Cold spray nozzle mach number limitation," *J. Therm. Spray Technol.*, vol. 11, no. 4, pp. 496–507, 2002.
- [38] A. Papyrin, V. Kosarev, S. Klinkov, A. Alkimov, and V. Fomin, *Cold spray technology*. 2007.
- [39] B. Samareh and A. Dolatabadi, "Dense Particulate Flow in a Cold Gas Dynamic Spray System," *J. Fluids Eng.*, vol. 130, no. August, p. 081702 (1-11), 2008.

Anexos

Anexo A – Mallas utilizadas

A continuación se muestran las mallas utilizadas para el modelamiento fluido-dinamico de las ocho microtoberas que son tratadas en este trabajo de título. Recordar que del análisis hecho en la <u>Sección 3.6.1</u> se desprende que las mallas tienen buenos resultados con más de 200 mil elementos y teniendo una mayor concentración de elementos en la garganta y la salida de la tobera.

Las dimensiones del volumen de control aparecen en la <u>Tabla 4.7</u>, mientras que la geometría estándar de las microtobera y las regiones que definen su volumen de control están representadas en la <u>Figura 3.7</u>.

Zona del Volumen de Control	Dimensiones [mm]	Tamaño de elemento [m]	Tamaño mín. local [m]
Cerca de la garganta	0.2 & 5.6	$1.19 \cdot 10^{-5}$	$3.61 \cdot 10^{-6}$
A la salida de la tobera	5.6 & 3.0	$1.19 \cdot 10^{-5}$	$3.61 \cdot 10^{-6}$
Sección convergente	0.8	$1.61 \cdot 10^{-5}$	$1.08 \cdot 10^{-5}$
<i>Free jet</i> cerca de eje axisimétrico	13 x 1.4	$1.90 \cdot 10^{-5}$	$1.70 \cdot 10^{-5}$
Sección divergente	30.8	$3.18 \cdot 10^{-5}$	$1.44 \cdot 10^{-5}$
Free jet lejos de eje axisimétrico	16 x 2.0	$3.30 \cdot 10^{-5}$	$1.79 \cdot 10^{-5}$

Tabla A.1: Configuración malla de 235 mil elementos. Microtobera N°1.

Zona del Volumen de Control	Dimensiones [mm]	Tamaño de elemento [m]	Tamaño mín. local [m]
Cerca de la garganta	0.15 & 4.5	$1.20 \cdot 10^{-5}$	$3.62 \cdot 10^{-6}$
A la salida de la tobera	4.5 & 3.0	$1.20 \cdot 10^{-5}$	$3.62 \cdot 10^{-6}$
Sección convergente	1	$1.61 \cdot 10^{-5}$	$1.08 \cdot 10^{-5}$
Free jet cerca de eje axisimétrico	13 x 1.5	$1.85 \cdot 10^{-5}$	$1.70 \cdot 10^{-5}$
Sección divergente	36	$3.19 \cdot 10^{-5}$	$1.44 \cdot 10^{-5}$
Free jet lejos de eje axisimétrico	16 x 2.0	$3.00 \cdot 10^{-5}$	$1.80 \cdot 10^{-5}$

Tabla A.2: Configuración malla de 250 mil elementos. Microtobera N°2

Zona del Volumen de Control	Dimensiones [mm]	Tamaño de elemento [m]	Tamaño mín. local [m]
Cerca de la garganta	0.2 & 4.8	$1.20 \cdot 10^{-5}$	$3.64 \cdot 10^{-6}$
A la salida de la tobera	4.8 & 3.0	$1.20 \cdot 10^{-5}$	$3.64 \cdot 10^{-6}$
Sección convergente	0.8	$1.62 \cdot 10^{-5}$	$1.09 \cdot 10^{-5}$
Free jet cerca de eje axisimétrico	13 x 1.5	$2.00 \cdot 10^{-5}$	$1.80 \cdot 10^{-5}$
Sección divergente	38.4	$3.21 \cdot 10^{-5}$	$1.45 \cdot 10^{-5}$
Free jet lejos de eje axisimétrico	16 x 2.0	$3.50 \cdot 10^{-5}$	$1.81 \cdot 10^{-5}$

Tabla A.3: Configuración malla de 230 mil elementos. Microtobera N°3

Zona del Volumen de Control	Dimensiones [mm]	Tamaño de elemento [m]	Tamaño mín. local [m]
Cerca de la garganta	0.2 & 4.0	$1.10 \cdot 10^{-5}$	$3.31 \cdot 10^{-6}$
A la salida de la tobera	4.0 & 3.0	$1.10 \cdot 10^{-5}$	$3.31 \cdot 10^{-6}$
Sección convergente	1	$1.48 \cdot 10^{-5}$	$9.92 \cdot 10^{-6}$
Free jet cerca de eje axisimétrico	13 x 1.3	$1.80 \cdot 10^{-5}$	$1.64 \cdot 10^{-5}$
Sección divergente	32	$2.92 \cdot 10^{-5}$	$1.32 \cdot 10^{-5}$
Free jet lejos de eje axisimétrico	16 x 2.0	$3.00 \cdot 10^{-5}$	$1.64 \cdot 10^{-5}$

Tabla A.4: Configuración malla de 235 mil elementos. Microtobera N°4

Zona del Volumen de Control	Dimensiones [mm]	Tamaño de elemento [m]	Tamaño mín. local [m]
Cerca de la garganta	0.2 & 5.6	$1.15 \cdot 10^{-5}$	$3.49 \cdot 10^{-6}$
A la salida de la tobera	5.6 & 3.0	$1.15 \cdot 10^{-5}$	$3.49 \cdot 10^{-6}$
Sección convergente	1.2	$1.55 \cdot 10^{-5}$	$1.04 \cdot 10^{-5}$
Free jet cerca de eje axisimétrico	13 x 1.3	$1.80 \cdot 10^{-5}$	$1.65 \cdot 10^{-5}$
Sección divergente	30.8	$3.08 \cdot 10^{-5}$	$1.39 \cdot 10^{-5}$
Free jet lejos de eje axisimétrico	16 x 2.0	$3.00 \cdot 10^{-5}$	$1.73 \cdot 10^{-5}$

Tabla A.5: Configuración malla de 245 elementos. Microtobera N°5

Zona del Volumen de Control	Dimensiones [mm]	Tamaño de elemento [m]	Tamaño mín. local [m]
Cerca de la garganta	0.2 & 3.7	$1.05 \cdot 10^{-5}$	$3.17 \cdot 10^{-6}$
A la salida de la tobera	3.7 & 3.0	$1.05 \cdot 10^{-5}$	$3.17 \cdot 10^{-6}$
Sección convergente	1.2	$1.41 \cdot 10^{-5}$	$9.49 \cdot 10^{-6}$
Free jet cerca de eje axisimétrico	13 x 1.2	$1.77 \cdot 10^{-5}$	$1.57 \cdot 10^{-5}$
Sección divergente	29.6	$2.80 \cdot 10^{-5}$	$1.27 \cdot 10^{-5}$
Free jet lejos de eje axisimétrico	16 x 2.0	$3.00 \cdot 10^{-5}$	$1.57 \cdot 10^{-5}$

Tabla A.6: Configuración malla de 230 mil elementos. Microtobera N°6

Zona del Volumen de Control	Dimensiones [mm]	Tamaño de elemento [m]	Tamaño mín. local [m]
Cerca de la garganta	0.2 & 4.8	$1.19 \cdot 10^{-5}$	$3.61 \cdot 10^{-6}$
A la salida de la tobera	4.8 & 3.0	$1.19 \cdot 10^{-5}$	$3.61 \cdot 10^{-6}$
Sección convergente	1	$1.61 \cdot 10^{-5}$	$1.08 \cdot 10^{-5}$
Free jet cerca de eje axisimétrico	13 x 1.45	$1.80 \cdot 10^{-5}$	$1.60 \cdot 10^{-5}$
Sección divergente	38.4	$3.18 \cdot 10^{-5}$	$1.44 \cdot 10^{-5}$
Free jet lejos de eje axisimétrico	16 x 2.0	$3.00 \cdot 10^{-5}$	$1.79 \cdot 10^{-5}$

Tabla A.7: Configuración malla de 250 mil elementos. Microtobera N°7

Zona del Volumen de Control	Dimensiones [mm]	Tamaño de elemento [m]	Tamaño mín. local [m]
Cerca de la garganta	0.2 & 3.7	$1.05 \cdot 10^{-5}$	$3.17 \cdot 10^{-6}$
A la salida de la tobera	3.7 & 3.0	$1.05 \cdot 10^{-5}$	$3.17 \cdot 10^{-6}$
Sección convergente	1.2	$1.41 \cdot 10^{-5}$	$9.49 \cdot 10^{-6}$
Free jet cerca de eje axisimétrico	13 x 1.2	$1.70 \cdot 10^{-5}$	$1.50 \cdot 10^{-5}$
Sección divergente	29.6	$2.80 \cdot 10^{-5}$	$1.27 \cdot 10^{-5}$
Free jet lejos de eje axisimétrico	16 x 2.0	$3.00 \cdot 10^{-5}$	$1.57 \cdot 10^{-5}$

 Tabla A.8: Configuración malla de 235 mil elementos. Microtobera N°8

Anexo B – Códigos validación de modelo definitivo

En primer lugar, se hace necesario almacenar los datos obtenidos desde Ansys FLUENT. El programa entrega los datos de velocidad, tiempo y posición en el eje x, todo esto versus la distancia recorrida por cada partícula (*path length*). El programa provee estos datos en formato .xy que básicamente es una variación del formato texto. Los datos son extraídos manualmente desde Ansys FLUENT y guardados bajo los nombres *temperature_Xum.xy*, *velocity_Xum.xy* y $x_position_Xum.xy$, donde X es el tamaño de partícula en micrones, como se muestra a continuación en la Figura B.1:

temperature_5um	File	14.309 KB	velocity_5um	File	14.309 KB	x_position_5um	File	16.170 KB
temperature_10um	File	14.569 KB	velocity_10um	File	14.570 KB	x_position_10um	File	16.465 KB
temperature_15um	File	14.592 KB	velocity_15um	File	14.593 KB	x_position_15um	File	16.495 KB
temperature_20um	File	29.611 KB	velocity_20um	File	29.613 KB	x_position_20um	File	33.478 KB
temperature_22um	File	14.822 KB	velocity_22um	File	14.823 KB	x_position_22um	File	16.763 KB
temperature_25um	File	44.626 KB	velocity_25um	File	44.629 KB	x_position_25um	File	50.472 KB
temperature_30um	File	14.960 KB	velocity_30um	File	14.961 KB	x_position_30um	File	16.926 KB
temperature_35um	File	15.140 KB	velocity_35um	File	15.142 KB	x_position_35um	File	17.133 KB
temperature_40um	File	15.208 KB	velocity_40um	File	15.211 KB	x_position_40um	File	17.218 KB
temperature_45um	File	15.335 KB	velocity_45um	File	15.340 KB	x_position_45um	File	17.363 KB

Figura B.1: Archivos de velocidad, temperatura y posición de las partículas en formato .xy

Los archivos son convertidos de formato .xy a .mat, manteniendo los mismos nombres originales, por medio de unas funciones que fueron creadas para este propósito y llamadas *importing_temperature.m*, *importing_velocity.m* e *importing_x_position-m*. Los archivos convertidos a formato .mat se guardan en el *Workspace* de Matlab, desde donde se procesan, además quedan en un archivo de respaldo.

El proceso de la conversión de los datos de .xy a .mat es el más lento, pudiendo llegar a demorar entre una y dos horas en computadores convencionales (entiéndase convencional por procesador quadcore de 2.8 GHz y 8 Gb de memoria RAM). Una de las razones es que el programa de hacer lectura y reescritura de una enorme cantidad de datos, alrededor de 21 millones de datos contenidos en todos los archivos que se muestran en la Figura B.1.

Para procesar los datos, la idea principal es encontrar los valores a una distancia de 6 mm desde la salida de la microtobera. Lo que hace el código en matlab es buscar estos valores dentro del arreglo de datos para cada uno de los 100 "lanzamientos" de partículas y para cada uno de los tamaños de partícula. Una vez que se tienen todos los datos seleccionados, se procede a obtener máximos, mínimos y promedios, y con ello se generan las gráficas que permiten representar visualmente los resultados obtenidos. El código en Matlab se muestra a continuación:

```
importing temperature;
importing velocity;
importing x position;
%parameters
nozzle length=0.021;
distance=0.006; %distance from nozzle outlet that is evaluated
eps up=5.5*10^-5;
eps down=0*10^-5;
x distance=nozzle length+distance;
%empty vectors
values T=[];
values V=[];
for ii=1:1:9
%assignments
eval(['x position=x position' num2str(5*ii) 'um;']);
eval(['velocity=velocity' num2str(5*ii) 'um;']);
eval(['temperature=temperature' num2str(5*ii) 'um;']);
%initialization
n=length(x position);
k=0;
hf=11;
%empty array
eval(['outletT ' num2str(5*ii) 'um=[];']);
eval(['outletV'' num2str(5*ii) 'um=[];']);
    %detecting values at outlet of the nozzle
for i=1:1:n
    %detecting if it's in range (close to position nozzle length)
    if x position(i) <x distance+eps up && x position(i) >x distance-eps down
        k=k+1;
        detector=0;
        eval(['outletT ' num2str(5*ii) 'um(k,:)=[k i temperature(i)];']);
        eval(['outletV' num2str(5*ii) 'um(k,:)=[k i velocity(i)];']);
        %detecting repeated particle
        for h=1:1:hf-1
            eval(['if k>h && outletT ' num2str(5*ii) 'um(k,2)-outletT '
num2str(5*ii) 'um(k-h,2)<hf detector=detector+1; end']);</pre>
        end
        %deleting values if the particle's already been used
        if detector~=0
            eval(['outletT_' num2str(5*ii) 'um(k,:)=[];']);
            eval(['outletV_' num2str(5*ii) 'um(k,:)=[];']);
            k=k-1;
        end
```

```
end
```

```
%number of particles that were simulated
eval(['number=length(outletT ' num2str(5*ii) 'um(:,1));']);
%just in case of errors
eval(['if outletT ' num2str(5*ii) 'um(number)~=number truth=true; else
truth=false; end']);
if truth==true
disp('ERROR - array length is not coherent');
end
%obtaining mean temperature and range
eval(['summation=ones(1,number)*outletT ' num2str(5*ii) 'um(:,3);']);
mean T=summation/number;
eval(['max T=max(outletT ' num2str(5*ii) 'um(:,3));']);
eval(['min T=min(outletT ' num2str(5*ii) 'um(:,3));']);
middle T=0.5*(max T+min T);
rangeT up=max T-mean T;
rangeT down=mean T-min T;
rangeT=rangeT up+rangeT down;
%obtaining mean velocity and range
eval(['summation=ones(1,number)*outletV ' num2str(5*ii) 'um(:,3);']);
mean V=summation/number;
eval(['max V=max(outletV ' num2str(5*ii) 'um(:,3));']);
eval(['min V=min(outletV ' num2str(5*ii) 'um(:,3));']);
middle V=0.5*(max V+min V);
rangeV up=max V-mean V;
rangeV down=mean V-min V;
rangeV=rangeV up+rangeV down;
%display
disp(['For ' num2str(5*ii) 'um-particles:']);
disp(['The mean outlet temperature is ' num2str(mean T) '°K and ' 'The mean
outlet velocity is ' num2str(mean V) 'm/s']);
disp(['The maximun outlet temperature is ' num2str(max T) '°K and ' 'The
maximun outlet velocity is ' num2str(max V) 'm/s']);
disp(['The minimun outlet temperature is ' num2str(min T) '°K and ' 'The
minimum outlet velocity is ' num2str(min V) 'm/s']);
disp(' ');
values T=[values T; min T mean T max T];
values_V=[values_V; min_V mean_V max_V];
clearvars x position velocity temperature;
clearvars i k hf detector n h number;
clearvars rangeV rangeT rangeV up rangeV down rangeT up rangeT down middle T
middle V;
clearvars max T max V min T min V mean T mean V summation;
end
clearvars truth ii;
clearvars nozzle length x distance eps up eps down;
plotting v2;
```

```
%plotting the results
close all;
%paper results
paper T=[ 125 147 170;
          145 165 185;
          170 185 200;
          182 195 208;
          208 220 233;
          220 230 240;
          235 240 250;
          238 245 255;
          240 250 260];
paper V=[ 860 910 955;
          770 810 850;
          650 680 720;
          610 650 680;
          540 580 625;
          510 550 575;
          465 510 545;
          450 490 525;
          440 475 505];
%vector with diameters in micrometers
size=[5:5:45];
%calculating errors and varibles
Tpneg(1,:)=(paper T(:,2)-paper T(:,1))';
Tppos(1,:)=(paper T(:,3)-paper T(:,2))';
Vpneg(1,:) = (paper V(:,2) - paper V(:,1)) ';
Vppos(1,:) = (paper V(:,3) - paper V(:,2)) ';
Tp=paper_T(:,2)';
Vp=paper_V(:,2)';
Trneg(1,:)=(values T(:,2)-values T(:,1))';
Trpos(1,:)=(values T(:,3)-values T(:,2))';
Vrneg(1,:) = (values V(:,2) - values V(:,1))';
Vrpos(1,:) = (values V(:,3) - values V(:,2))';
Tr=values T(:,2)';
Vr=values_V(:,2)';
dx = 0.5;
%plotting comparating values
subplot(1,2,1);
errorbar(size-dx, Tp, Tpneg, Tppos, 'bs');
hold on;
errorbar(size+dx,Tr,Trneg,Trpos,'rs');
title(['Temperature at ' num2str(1000*distance) 'mm from the nozzle outlet']);
ylabel('Temperature °K');
xlabel('Particle diameter [um]');
legend('Sova el al. (2018)','Simulation results','Location','southeast');
```

```
subplot(1,2,2);
errorbar(size-dx, Vp, Vpneg, Vppos, 'bs');
hold on;
errorbar(size+dx,Vr,Vrneg,Vrpos,'rs');
title(['Velocity at ' num2str(1000*distance) 'mm from the nozzle outlet']);
ylabel('Velocity m/s');
xlabel('Particle diameter [um]');
legend('Sova et al. (2018)','Simulation results','Location','southwest');
%plotting errors
error T=100.*(Tp-Tr)./Tp;
error V=100.*(Vr-Vp)./Vp;
figure;
subplot(1,2,1);
plot(size,error T,'k');
title(['Percentage error of Mean Temperature']);
ylabel('Error %');
xlabel('Particle diameter [um]');
subplot(1, 2, 2);
plot(size,error_V,'k');
title(['Percentage error of Mean Velocity']);
ylabel('Error %');
xlabel('Particle diameter [um]');
clearvars size distance paper T paper V values T values V error T error V;
clearvars Tp Vp Tpneg Vpneg Tppos Vppos Tr Vr Trneg Vrneg Trpos Vrpos dx;
```

Con este código se generan la <u>Figura 4.11</u> y la <u>Figura 4.12</u> del presente informe que representan la velocidad y temperatura de impacto respectivamente, a una distancia de 6 mm desde la salida de la microtobera.

```
size distribution;
minimum=15;
datav3=filtro(datav,minimum);
%initializing
velocity=[400:25:850]';
L=length (velocity);
dL=length(datav3(:,1));
c=zeros(L,1);
for ii=1:1:dL
    eval(['n=length(outletT ' num2str(datav3(ii,1)) 'um(:,1));']);
    8n
    for k=1:1:n
    for i=1:1:L
     eval(['if -(400+25*(i-1))+outletV ' num2str(datav3(ii,1)) 'um(k,3)<25 &&</pre>
-(400+25*(i-1))+outletV ' num2str(datav3(ii,1)) 'um(k,3)>0' '
c(i)=c(i)+(1/n)*datav3(ii,2); end']);
    end
    end
end
%plotting results
figure;
bar(velocity,c,'b');
title('Velocity distribution');
xlabel('Particle velocity [m/s]');
ylabel('Particle percentage [%]');
mean velocity=(1/100) * (velocity'*c);
clc;
disp(['Mean velocity according to simulation: ' num2str(mean velocity) '
m/s.']);
disp(['Mean velocity according to paper Sova: ' num2str(607) ' m/s.']);
disp(['Error: ' num2str(100*(mean_velocity-607)/607) ' %']);
clearvars i ii k L n count velocity data datav2;
clearvars data0 datav datav0 datav3 dL factor minimum orden orderv;
clearvars sum x xL y c;
```

Con este código se obtiene la distribución de velocidades y la velocidad media que se muestra en la Figura 4.14 del presente informe.

Anexo C – Códigos para mezclas binarias

Los datos de las propiedades termodinámicas del Helio y el Nitrógeno se guardan en un par de archivos de texto de nombre *Helium.txt* y *Nitrogen.txt* respectivamente. La Figura C.1 muestra el formato en el que se escriben los datos.

23 Helium - Notepad File Edit Format View Help Value Unit Property ٠ Medium : helium state of aggregation : gas Pressure : 50 bar Temperature : 526.85 Celsius f Density : 3.026 kg / m3 Specific Enthalpy : 4185.000 [kJ / kg] Specific Entropy : [k] / kg K] 28.38000 Specific isobar heat capacity : 5.191000 ср [k] / kg K] Specific isochor heat capacity : cv 3.122000 [kJ / kg K] Isobar coefficient of thermal expansion 1.240000 10-3 (W / m * K) Heat conductance 308.0000 10-6 (Pa's)] Dynamic viscosity : 39.50000 10-6 m2 / Kinematic viscosity : 13.0535360211 sl 10-7 m2 / Thermal diffusivity : 196.0000 sl Prandtl-Number : 0.665 Coefficient of compressibility Z . [m/s] speed of sound : 1675.000 X Nitrogen - Notepad File Edit Format View Help Property Value Unit ۸ Medium : nitrogen state of aggregation : gas 50 Pressure : bar 1 Temperature 526.85 Celsius 20.707545 Density : Г kg / m3] [ḱ] / kg] [k] / kg к] Specific Enthalpy : 849.07475 Specific Entropy : 6.724053 heat capacity Specific isobar [k] / ср 1.129907 kg K] Specific isochor heat capacity 0.8272366 [k]/kgκ] cv Isobar coefficient of thermal expansion 1.241262 56.046475 Heat conductance 10-3 (W / m * K) [10-6 (Pa s) Dynamic viscosity : 36.11402] [10-6 m2 / s] [10-7 m2 / s] Kinematic viscosity : 1.752271 Thermal diffusivitý : 24.06028 0.72824715 Prandtl-Number : Coefficient of compressibility Z : 1.0197315 speed of sound : 580.67255 [m/s] 111

Figura C.1: Formato de escritura de la base de datos de las propiedades termodinámicas Ejemplo datos del Helio (arriba), Ejemplo datos del Nitrógeno (abajo).

Los archivos son convertidos de texto a arreglos en formato *.mat* para que sean procesados por *Matlab*. El código en *Matlab* es usado para calcular los valores y las constantes que aparecen en la <u>Tabla 4.1</u>, <u>Tabla 4.2</u>, <u>Tabla 4.3</u> y <u>Tabla 4.4</u> se muestra a continuación. En este caso *pHe* es el *input* que representa el porcentaje de Helio de la mezcla, como fracción molar.

Código C.1: Mixtures.m – Código para calcular propiedades termodinámicas de mezclas

```
clear all;
load('Helium.mat');
load('Nitrogen.mat');
dataN2=Nitrogen;
dataHe=Helium;
pHe=0.6;
pN2=1-pHe;
R=8.314472*10^3;
PM N2=28.0134; PM He=4.002602;
Pi=3.5; Pf=0.06; Ti=750; Tf=200; n=2; m=2; num=20;
dP=(Pf-Pi)/(num); dT=(Tf-Ti)/(num);
T=[]; P=[]; Cp=[]; k=[]; mu=[];
PM=pN2*PM N2+pHe*PM He;
for i=1:1:num+1
    T(i) = Ti + (i-1) * dT;
    if i==1
        P(i)=Pi;
    else
        gamma=Cp(i-1)/(Cp(i-1)-R/PM);
        P(i)=Pi*(T(i)/Ti)^(gamma/(gamma-1));
    end
Cp(i)=specific heat Cp(dataHe,dataN2,pHe,T(i),P(i));
k(i)=thermal conductivity(dataHe,dataN2,pHe,T(i),P(i));
mu(i)=viscosity(dataHe,dataN2,pHe,T(i),P(i));
end
coeff Cp=[]; coeff k=[]; coeff mu=[];
ceros=zeros(1,n-m);
coeff Cp=polyfit(T,Cp,n);
coeff k=polyfit(T,k,m);
coeff k=[ceros coeff_k];
coeff mu=polyfit(T,mu,m);
coeff mu=[ceros coeff mu];
Tx=[]; Tp=[]; Cpp=[]; kp=[]; mup=[];
for j=1:1:num+1
for i=1:1:n+1
```

```
Tx(j)=Ti+(j-1)*dT;
    Tp(i,j) = Tx(j)^{(n+1-i)};
end
end
Cpp=coeff Cp*Tp;
kp=coeff k*Tp;
mup=coeff mu*Tp;
close all;
subplot(1,3,1);
plot(T,Cp,'b');
hold on;
plot(Tx,Cpp,'r');
title('specific heat Cp');
xlabel('temperature K');
subplot(1,3,2);
plot(T,k,'b');
hold on;
plot(Tx,kp,'r');
title('thermal conductivity k');
xlabel('temperature K');
subplot(1,3,3);
plot(T,mu, 'b');
hold on;
plot(Tx,mup,'r');
title('viscosity mu');
xlabel('temperature K');
T 0=300;
s=0;
error min=1000;
error min1=1000;
mu 0=viscosity(dataHe,dataN2,pHe,T 0,2);
for SS=5:5:200
    mur1=viscosity(dataHe,dataN2,pHe,Ti,Pi);
    mur2=viscosity(dataHe,dataN2,pHe,Tf,Pf);
    muc1=mu 0*((Ti/T 0)^1.5)*((T 0+SS)/(Ti+SS));
    muc2=mu_0*((Tf/T_0)^1.5)*((T_0+SS)/(Tf+SS));
    error1=abs((muc1-mur1)/mur1);
    error2=abs((muc2-mur2)/mur2);
    error=error1+error2;
    if error<error_min || error1<error_min1</pre>
        error min=error;
        error min1=error1;
        S=SS;
    end
end
L=length(Tx);
mu s=[];
```

```
for i=1:1:L
  mu_s(i)=mu_0*((Tx(i)/T_0)^1.5)*((T_0+S)/(Tx(i)+S));
end
hold on;
subplot(1,3,3);
plot(Tx,mu_s,'g');
clearvars a ans Cp Cpp dataHe dataN2 dP dT;
clearvars error error1 error2 error_min error_max exc error_min1;
clearvars Helium i j k kp L mu mu_s muc1 muc2 num m n ceros;
clearvars mup mur1 mur2 n Nitrogen P Pf Pi PM_He PM_N2 pN2 SS T Tf Ti Tp Tx;
clearvars x y z gamma R;
```

Las funciones auxiliares que usa el código se muestran a continuación:

Código C.2: Properties_He.m – Función para obtener propiedades del Helio

```
function y=properties He(data,T,P)
%Initialization
Tc=T-273.15;
Pb=10*P;
P data=[0.5 25 50];
Lp=length(P data);
T data=[200:100:800]-273.15;
Lt=length(T data);
gamma=5/3;
%range of temperature
if T>=200 && T<=800
for i=1:1:Lt
    if T data(Lt-i+1)>=Tc
        Tmax=T data(Lt-i+1);
    end
    if T data(i) <= Tc
        Tmin=T data(i);
    end
end
else if T<200
        Tmax=T data(2);
        Tmin=T data(1);
else if T>800
        Tmax=T data(Lt);
        Tmin=T_data(Lt-1);
    end
    end
end
%range of pressure
if Pb>=1 && Pb<=50
for i=1:1:Lp
```

```
if P data(Lp-i+1)>=Pb
        Pmax=P data(Lp-i+1);
    end
    if P data(i) <= Pb</pre>
        Pmin=P data(i);
    end
end
else if Pb<1
        Pmax=P data(2);
        Pmin=P data(1);
else if Pb>50
        Pmax=P data(Lp);
        Pmin=P data(Lp-1);
    end
    end
end
if Tmax>Tmin
ftmin=(Tmax-Tc)/(Tmax-Tmin);
ftmax=(Tc-Tmin)/(Tmax-Tmin);
else
ftmin=1;
ftmax=0;
end
if Pmax>Pmin
fpmin=(Pmax-Pb)/(Pmax-Pmin);
fpmax=(Pb-Pmin)/(Pmax-Pmin);
else
fpmin=1;
fpmax=0;
end
Lv=length(data(:,1));
eps=10^-6; %for some reason, matlab is not working well
           %when comparing double format
%obtaining values
for i=1:20:Lv-19
    if abs(data(i,1)-Pmin)<eps && abs(data(i+1,1)-Tmin)<eps</pre>
        yTminPmin=data(i:1:i+19,1);
    end
    if abs(data(i,1)-Pmin)<eps && abs(data(i+1,1)-Tmax)<eps</pre>
        yTmaxPmin=data(i:1:i+19,1);
    end
    if abs(data(i,1)-Pmax)<eps && abs(data(i+1,1)-Tmin)<eps</pre>
        yTminPmax=data(i:1:i+19,1);
    end
    if abs(data(i,1)-Pmax)<eps && abs(data(i+1,1)-Tmax)<eps</pre>
        yTmaxPmax=data(i:1:i+19,1);
    end
end
%interpolation
yPmin=ftmin.*yTminPmin+ftmax.*yTmaxPmin;
yPmax=ftmin.*yTminPmax+ftmax.*yTmaxPmax;
y=fpmin.*yPmin+fpmax.*yPmax;
```

%constants

```
PM=4.0026*10^-3;
Rig=8.3144598;
Rk=Rig/PM;
%final result in I.S.
y(isnan(y)) = [];
y(1,1) = (10^5) * y(1,1);
                                        %pressure
y(2,1) = y(2,1) + 273.15;
                                        %temperature
y(3,1) = y(1,1) / (Rk*y(2,1));
                                        %density
v(4,1) = (10^3) * v(4,1);
                                       %specific enthalpy
y(5,1) = (10^3) * y(5,1);
                                       %specific entropy
y(6,1) = (10^3) * y(6,1);
                                       %Ср
y(7,1) = (10^3) * y(7,1);
                                        %Cv
y(8,1) = (10^{-3}) * y(8,1);
                                       %isobar thermal expansion
y(9,1) = (10^{-3}) * y(9,1);
                                       %heat conductance
y(10,1) = (10^{-6}) * y(10,1);
                                       %dynamic viscosity
y(11,1) = y(10,1) / y(3,1);
                                       %kinetic viscosity
y(12,1) = (10^{-7}) * y(12,1);
                                       %thermal diffusivity
y(13,1) = y(13,1);
                                        %Prandtl Number
y(14,1)=y(1,1)/(Rk*y(2,1)*y(3,1)); %compressibility Z
y(15,1) = y(15,1);
                                        %speed of sound
%errors
%mu0 = 3.93267e−5 T0 = 809 C0 = 147.2
mu=((3.93267e-5)*(T/809)^1.5)*((809+147.2)/(T+147.2));
rho=y(1,1)/(Rk*T);
v=mu/rho;
i=(gamma/(gamma-1))*Rk*T;
c=sqrt(gamma*Rk*T);
Pp=(10^6)*P;
y(1,2) = abs(y(1,1) - Pp)/Pp;
                                                         %pressure
y(2,2) = abs(y(2,1) − T)/T;
                                                         %temperature
y(3,2) = abs(y(3,1) - rho)/y(3,1);
                                                         %density
y(4,2) = abs(y(4,1)-i)/y(4,1);
                                                         %specific enthalpy
y(5,2)=0;
                                                         %specific entropy
y(6,2) = abs(2.5*Rk-y(6,1))/y(6,1);
                                                         %Cp
y(7,2) = abs(1.5*Rk-y(7,1))/y(7,1);
                                                         %Cv
                                                         %isobar thermal
y(8,2)=0;
expansion
                                                         %heat conductance
y(9,2)=0;
y(10,2) = abs(mu-y(10,1))/mu;
                                                         %dynamic viscosity
y(11,2) = abs(v-y(11,1))/v;
                                                         %kinetic viscosity
                                                         %thermal diffusivity
y(12, 2) = 0;
y(13,2) = abs(y(13,1)-2/3)/(2/3);
                                                         %Prandtl Number
y(14,2)=abs(y(14,1)-1)/1;
                                                         %compressibility Z
y(15,2)=abs(y(15,1)-c)/y(15,1);
                                                         %speed of sound
```

```
end
```

```
function y=properties N2(data,T,P)
%Initialization
Tc=T-273.15;
Pb=10*P;
P data=[1 25 50];
Lp=length(P data);
T data=[200:100:800]-273.15;
Lt=length(T data);
gamma=1.4;
%range of temperature
if T>=200 && T<=800
for i=1:1:Lt
    if T data(Lt-i+1)>=Tc
        Tmax=T data(Lt-i+1);
    end
    if T data(i) <=Tc</pre>
        Tmin=T data(i);
    end
end
else if T<200
        Tmax=T_data(2);
        Tmin=T data(1);
else if T>800
        Tmax=T data(Lt);
        Tmin=T data(Lt-1);
    end
    end
end
%range of pressure
if Pb>=1 && Pb<=50
for i=1:1:Lp
    if P data(Lp-i+1)>=Pb
        Pmax=P data(Lp-i+1);
    end
    if P data(i) <= Pb</pre>
        Pmin=P data(i);
    end
end
else if Pb<1
        Pmax=P_data(2);
        Pmin=P data(1);
else if Pb>50
        Pmax=P data(Lp);
        Pmin=P data(Lp-1);
    end
    end
end
if Tmax>Tmin
ftmin=(Tmax-Tc)/(Tmax-Tmin);
ftmax=(Tc-Tmin)/(Tmax-Tmin);
```

```
else
ftmin=1;
ftmax=0;
end
if Pmax>Pmin
fpmin=(Pmax-Pb)/(Pmax-Pmin);
fpmax=(Pb-Pmin)/(Pmax-Pmin);
else
fpmin=1;
fpmax=0;
end
Lv=length(data(:,1));
eps=10^-6; %for some reason, matlab is not working well %when comparing double
%obtaining values
for i=1:20:Lv-19
    if abs(data(i,1)-Pmin)<eps && abs(data(i+1,1)-Tmin)<eps
        yTminPmin=data(i:1:i+19,1);
    end
    if abs(data(i,1)-Pmin)<eps && abs(data(i+1,1)-Tmax)<eps</pre>
        yTmaxPmin=data(i:1:i+19,1);
    end
    if abs(data(i,1)-Pmax)<eps && abs(data(i+1,1)-Tmin)<eps</pre>
        yTminPmax=data(i:1:i+19,1);
    end
    if abs(data(i,1)-Pmax)<eps && abs(data(i+1,1)-Tmax)<eps</pre>
        yTmaxPmax=data(i:1:i+19,1);
    end
end
%interpolation
yPmin=ftmin.*yTminPmin+ftmax.*yTmaxPmin;
yPmax=ftmin.*yTminPmax+ftmax.*yTmaxPmax;
y=fpmin.*yPmin+fpmax.*yPmax;
%constants
PM=28.0134*10^-3;
Rig=8.3144598;
Rk=Rig/PM;
%final result in I.S.
y(isnan(y))=[];
y(1,1) = (10^5) * y(1,1);
                                         %pressure
y(2,1) = y(2,1) + 273.15;
                                         %temperature
y(3,1) = y(1,1) / (Rk*y(2,1));
                                         %density
y(4,1) = (10^3) * y(4,1);
                                         %specific enthalpy
y(5,1) = (10^3) * y(5,1);
                                         %specific entropy
y(6,1) = (10^3) * y(6,1);
                                         °Ср
y(7,1) = (10^3) * y(7,1);
                                         %Cv
y(8,1) = (10^{-3}) * y(8,1);
                                         %isobar thermal expansion
y(9,1) = (10^{-3}) * y(9,1);
                                        %heat conductance
y(10, 1) = (10^{-6}) * y(10, 1);
                                        %dynamic viscosity
y(11,1) = y(10,1) / y(3,1);
                                        %kinetic viscosity
y(12,1) = (10^{-7}) * y(12,1);
                                         %thermal diffusivity
y(13,1) = y(13,1);
                                         %Prandtl Number
y(14,1) = y(1,1) / (Rk*y(2,1)*y(3,1));
                                         %compressibility Z
y(15,1) = y(15,1);
                                         %speed of sound
```

```
130
```

```
%errors
mu = ((26.163175 \times 10^{-6}) \times (T/500) \times ((500+135) / (T+135));
rho=y(1,1)/(Rk*T);
v=mu/rho;
i=(gamma/(gamma-1))*Rk*T;
c=sqrt(gamma*Rk*T);
Pp=(10^6)*P;
y(1,2) = abs(y(1,1) - Pp)/Pp;
                                                           %pressure
y(2,2) = abs(y(2,1) - T)/T;
                                                           %temperature
                                                           %density
y(3,2) = abs(y(3,1) - rho)/y(3,1);
                                                           %specific enthalpy
y(4,2) = abs(y(4,1)-i)/y(4,1);
y(5,2)=0;
                                                           %specific entropy
y(6,2) = abs(3.5*Rk-y(6,1))/y(6,1);
                                                           %Cp
y(7,2) = abs(2.5*Rk-y(7,1))/y(7,1);
                                                           %Cv
                                                           %isobar thermal
y(8,2)=0;
expansion
y(9,2)=0;
                                                           %heat conductance
                                                           %dynamic viscosity
y(10,2) = abs(mu-y(10,1))/mu;
y(11,2)=abs(v-y(11,1))/v;
                                                           %kinetic viscosity
y(12, 2) = 0;
                                                           %thermal diffusivity
                                                           %Prandtl Number
y(13,2) = abs(y(13,1)-0.73)/0.73;
y(14,2) = abs(y(14,1)−1)/1;
                                                           %compressibility Z
                                                           %speed of sound
y(15,2) = abs(y(15,1)-c)/y(15,1);
```

end

Código C.4: Density.m – Función para obtener densidad de mezclas

```
function y=density(dataHe,dataN2,pHe,T,P)
y1=properties_He(dataHe,T,P);
y2=properties_N2(dataN2,T,P);
if max(y1(10,2),y2(10,2))>=0.09
    disp('ERROR: Result doesnt agree with Ideal Gas Law');
    y=NaN;
else
    yy=pHe.*y1+(1-pHe).*y2;
    y=yy(3,1);
end
end
```

Código C.5: Specific_heat_Cp.m – Función para calcular calor específico Cp de mezclas

```
function y=specific_heat_Cp(dataHe, dataN2, pHe, T, P)
y1=properties_N2(dataN2, T, P);
y2=properties_N2(dataN2, T, P);
PM_N2=28.0134; PM_He=4.002602;
fHe=(pHe*PM_He)/(pHe*PM_He+(1-pHe)*PM_N2);
yy=fHe.*y1+(1-fHe).*y2;
y=yy(6,1);
if yy(6,2)>0.1
    txt=['error Cp: ' num2str(yy(6,2)) '% at P= ' num2str(P) ' MPa and T= '
num2str(T) ' K.'];
    disp(txt);
end
end
```

Código C.6: Specific_heat_Cv.m – Función para calcular calor específico Cv de mezclas

```
function y=specific_heat_Cv(dataHe, dataN2, pHe, T, P)
y1=properties_He(dataHe, T, P);
y2=properties_N2(dataN2, T, P);
PM_N2=28.0134; PM_He=4.002602;
fHe=(pHe*PM_He)/(pHe*PM_He+(1-pHe)*PM_N2);
yy=fHe.*y1+(1-fHe).*y2;
y=yy(7,1);
if yy(7,2)>0.1
    txt=['error Cp: ' num2str(yy(7,2)) '% at P= ' num2str(P) ' MPa and T= '
num2str(T) ' K.'];
    disp(txt);
end
end
```
```
function y=thermal conductivity(dataHe,dataN2,pHe,T,P)
xHe=[];
x = [0 \ 0.05 \ 0.1 \ 0.2 \ 0.22 \ 0.25 \ 0.5 \ 0.534
                                                          0.6
                                                                     0.8
0.837 0.9 1];
y=[0 0.01 0.0365 0.073 0.0769 0.097560975 0.21951 0.23070 0.31707317 0.5609
0.6153 0.75609 1];
n=4; coeff=polyfit(x,y,n); coeff(end)=0; coeff(end-1)=coeff(end-1)+(1-
ones(1, n+1) *coeff');
for a=n:-1:0
   xHe=[xHe;pHe^a];
end
fHe=coeff*xHe;
y1=properties He(dataHe,T,P);
y2=properties_N2(dataN2,T,P);
yy=fHe.*y1+(1-fHe).*y2;
y=yy(9,1);
if yy(9,2)>0.1
   txt=['error k: ' num2str(yy(9,2)) '% at P= ' num2str(P) ' MPa and T= '
num2str(T) ' K.'];
   disp(txt);
end
end
```

Código C.8: Viscosity.m – Función para calcular la viscosidad de una mezcla

```
function y=viscosity(dataHe,dataN2,pHe,T,P)
y1=properties_He(dataHe,T,P);
y2=properties_N2(dataN2,T,P);
yy=pHe.*y1+(1-pHe).*y2;
y=yy(10,1);
if yy(10,2)>0.1
    txt=['error mu: ' num2str(yy(10,2)) '% at P= ' num2str(P) ' MPa and T= '
num2str(T) ' K.'];
    disp(txt);
end
```

```
end
```

Anexo D – Resultados caracterización de mezclas

D.1 Nitrógeno puro

Utilizando la metodología planteada en la <u>Sección 3.4</u> de este informe y la base de datos provista por *Peace Software* [26], las propiedades del propiedades del Nitrógeno son representadas como se muestra en las <u>Figura D.1</u>, <u>Figura D.2</u> y <u>Figura D.3</u>.



Figura D.1: Calor específico Cp del Nitrógeno como función de la temperatura Valores obtenidos de la base de datos (azul), Interpolación de segundo orden (rojo).



Figura D.2: Conductividad térmica del Nitrógeno como función de la temperatura Valores de la base de datos (azul), Interpolación de segundo orden (rojo).



Figura D.3: Viscosidad del Nitrógeno como función de la temperatura Valores de la base de datos (azul), Interpolación de segundo orden (rojo). Ley de Sutherland (verde).

D.2 Mezcla 10% Helio





Figura D.4: Calor específico Cp de mezclas 10% Helio como función de la temperatura Valores obtenidos de la base de datos (azul), Interpolación de segundo orden (rojo)







Figura D.6: Viscosidad de mezcla 10% Helio como función de la temperatura Valores de la base de datos (azul), Interpolación de segundo orden (rojo), Ley de Sutherland (verde)

D.3 Mezcla 20% Helio

Figura D.7, Figura D.8 y Figura D.9 muestran las propiedades de la mezcla 20% Helio.







Figura D.8: Conductividad térmica de mezcla 20% Helio como función de la temperatura Valores de la base de datos (azul), Interpolación de segundo orden (rojo)



Figura D.9: Viscosidad de mezcla 20% Helio como función de la temperatura Valores de la base de datos (azul), Interpolación de segundo orden (rojo). Ley de Sutherland (verde).

D.4 Mezcla 28% Helio

Figura D.10, Figura D.11 y Figura D.12 muestran las propiedades de mezcla 28% Helio.



Figura D.10: Calor específico Cp de mezcla 28% Helio como función de la temperatura Valores obtenidos de la base de datos (azul), Interpolación de segundo orden (rojo).









D.5 Mezcla 40% Helio

Figura D.13, Figura D.14 y Figura D.15 muestran las propiedades de mezcla 40% Helio.







Figura D.14: Conductividad térmica de mezcla 40% Helio como función de la temperatura Valores de la base de datos (azul), Interpolación de segundo orden (rojo).



Figura D.15: Viscosidad de mezcla 40% Helio como función de la temperatura Valores de la base de datos (azul), Interpolación de segundo orden (rojo). Ley de Sutherland (verde).

D.6 Mezcla 60% Helio

Figura D.16, Figura D.17 y Figura D.18 muestran las propiedades de mezcla 60% Helio.



Figura D.16: Calor específico Cp de mezcla 60% Helio como función de la temperatura Valores obtenidos de la base de datos (azul), Interpolación de segundo orden (rojo).







Figura D.18: Viscosidad de mezcla 60% Helio como función de la temperatura Valores de la base de datos (azul), Interpolación de segundo orden (rojo), Ley de Sutherland (verde)

Anexo E – Código para optimización de toberas

A continuación se muestran los códigos principales con los cuales se optimizan la configuración de las microtobera. Recordar que se asume que se trata de toberas ideales y se maximiza únicamente la velocidad de salida del gas de trabajo.

Código E.1: Optimization.m – Código para optimizar configuración de microtobera

```
clear all;
clc;
i=0;
%initializing
Vmax=0;
De opt=0;
Dcr opt=0;
L opt=0;
To opt=0;
Po opt=0;
gamma opt=0;
%discretizing
dD=0.1;
dL=1;
dT = 10;
dP=0.1;
fHe max=1;
fHe min=0;
y0=(fHe max)*(5/3)+(1-fHe max)*(7/5);
yf=(fHe min)*(5/3)+(1-fHe min)*(7/5);
dy=(y0-yf)/50;
if dy==0
    dy=1;
end
%domain from the least to the most important variable
for Po=3.5:dP:3.5 % higher is better (if this allows to reach room
pressure at the nozzle exit)
for To=750:-dT:750 % colder is better
for Dcr=1.4:-dD:1.1 % thiner will increase the angle
for L=37:dL:48 % longer is better
for gamma=y0:-dy:yf % lower is better
    Ve=v exit(De,Dcr,L,To,Po,gamma);
     r=restrictions(De,Dcr,L,To,Po,gamma);
         i=i+1;
     if Vmax==0 && r==1
         disp(['iteration ' num2str(i)]);
     end
```

```
if Ve>=Vmax && r==0
        disp(['compatible nozzle! iteration ' num2str(i)]);
        Vmax=Ve;
        De opt=De;
        Dcr opt=Dcr;
        L opt=L;
        To opt=To;
        Po opt=Po;
        gamma opt=gamma;
    end
end
end
end
end
end
end
Mexit=m exit(De opt,Dcr opt,L opt,To opt,Po opt,gamma opt);
Pexit=p exit(De opt,Dcr opt,L opt,To opt,Po opt,gamma opt);
Texit=t exit(De opt,Dcr opt,L opt,To opt,Po opt,gamma opt);
Vexit=v exit(De opt,Dcr opt,L opt,To opt,Po opt,gamma opt);
ang=theta(De opt,Dcr opt,L opt,To opt,Po opt,gamma opt);
pHe=p_He(De_opt,Dcr_opt,L_opt,To_opt,Po_opt,gamma_opt);
disp(' ');
disp('Optimization results:');
disp(' ');
disp(['Maximum outlet velocity: ' num2str(Vmax) ' m/s']);
disp(['The percentage of Helium is ' num2str(100*pHe) '%']);
disp(['Length of diverging section: ' num2str(L opt) 'mm']);
disp(['Exit diameter: ' num2str(De_opt) 'mm']);
disp(['Throat diameter: ' num2str(Dcr opt) 'mm']);
disp(['Inlet temperature: ' num2str(To opt) '°K']);
disp(['Inlet pressure: ' num2str(Po_opt) 'MPa']);
clearvars L i r Ve To Po Dcr De dD gamma dL dP dT gamma y0 dy fHe max fHe min
```

Código E.2: V_exit.m – Función objetivo, velocidad de salida del gas

```
function y=v_exit(De,Dcr,L,To,Po,gamma)
R=rig(gamma);
[M,error]=m_exit(De,Dcr,L,To,Po,gamma);
Te=t_exit(De,Dcr,L,To,Po,gamma);
if error<=0.001 && error>=0
    y=M*sqrt(gamma*R*Te);
else
    y=0;
end
end
```

y0 yf;

```
function y=restrictions(De, Dcr, L, To, Po, gamma)
d=0; %d=1 to display, d=0 to turn it off.
r=0; rL=L/De; rD=De/Dcr;
Pe=p exit(De,Dcr,L,To,Po,gamma);
Te=t exit(De,Dcr,L,To,Po,gamma);
Me=m exit(De,Dcr,L,To,Po,gamma);
ang=theta(De,Dcr,L,To,Po,gamma);
pHe=p He(De,Dcr,L,To,Po,gamma);
if Pe>0.102 || Pe<0.06
    r=1;
    if d==1
    disp('Exit pressure out of range');
    disp(['P exit= ' num2str(Pe) ' MPa.']);
    end
else if Me<2 || Me>3.5
   r=1;
    if d==1
    disp('exit Mach number out of range');
    disp(['M exit= ' num2str(Me) '.']);
    end
else if ang>5 || ang<1</pre>
    r=1;
    if d==1
    disp('Angle out of range');
    disp(['Theta= ' num2str(ang) '°.']);
    end
else if rL<15 || rL>20
    r=1;
    if d==1
    disp('Length ratio out of range');
    disp(['L/De= ' num2str(rL)]);
    end
else if rD<=1 || rD>3
    r=1;
    if d==1
    disp('Diameter ratio out of range');
    disp(['De/Dcr= ' num2str(rD)]);
    end
else if pHe>1 || pHe<0
    r=1;
    if d==1
    disp('Amount of Helium out of range');
    disp([num2str(100*pHe) '% of Helium']);
    end
else if Te<200
   r=1;
    if d==1
    disp('Outlet temperature out of range');
    disp(['T exit= ' num2str(Te) '°K']);
   end
   end
   end
   end
   end
   end
   end
end
y=r;
```

Anexo F – Código para cálculo de eficiencia

Para procesar los datos de velocidades y temperaturas de las partículas y determinar las velocidades y temperaturas de impacto, es necesario guardar los archivos ordenadamente como se muestra a continuación. Las carpetas en las que se guardan los archivos se muestran a continuación en la Figura F.1.



Figura F.1: Carpetas para datos de velocidad y temperatura de las partículas

Los archivos como tales también deben tener los nombres correctos para que sean procesados por el programa. Como se muestra en la Figura F.2 Este es un ejemplo para los datos correspondientes a la partícula de 5 μm .

Current Folder	\odot
Name 🔺	
temperature_5um	
velocity_5um	
x_position_5um	

Figura F.2: Ejemplo nombre de archivos de datos en formato .xy

El código para procesar los datos se muestra a continuación.

Código F.1: *Data_processing.m – Código para procesas los datos y calcular eficiencia*

```
clear all;
clc;
currentFolder=pwd;
NozzleNumber=4; nozzle length=0.042;
load('processed data.mat');
%import temperature; import velocity; import x position;
%parameters
distance=0.015; %distance from nozzle outlet that is evaluated
eps up=5.5*10^-5;
eps down=0*10^{-5};
x distance=nozzle length+distance;
%empty vectors
values T=[];
values V=[];
for ii=1:1:9
%assignments
eval(['x position=x position' num2str(5*ii) 'um;']);
eval(['velocity=velocity' num2str(5*ii) 'um;']);
eval(['temperature=temperature' num2str(5*ii) 'um;']);
%initialization
n=length(x position);
k=0;
hf=11;
%empty arrangement
eval(['outletT_' num2str(5*ii) 'um=[];']);
eval(['outletV_' num2str(5*ii) 'um=[];']);
    %detecting values at outlet of the nozzle
for i=1:1:n
    %detecting if it's in range (close to nozzle length position)
    if x position(i)<x distance+eps up && x position(i)>x distance-eps down
        k=k+1;
        detector=0;
        eval(['outletT ' num2str(5*ii) 'um(k,:)=[k i temperature(i)];']);
        eval(['outletV ' num2str(5*ii) 'um(k,:)=[k i velocity(i)];']);
        %detecting repeated particle
        for h=1:1:hf-1
            eval(['if k>h && outletT ' num2str(5*ii) 'um(k,2)-outletT '
num2str(5*ii) 'um(k-h,2)<hf detector=detector+1; end']);</pre>
        end
        %deleting values if the particle's already been used
```

```
if detector~=0
            eval(['outletT_' num2str(5*ii) 'um(k,:)=[];']);
eval(['outletV ' num2str(5*ii) 'um(k,:)=[];']);
            k=k-1;
        end
    end
end
%number of particles that were simulated
eval(['number=length(outletT ' num2str(5*ii) 'um(:,1));']);
%just in case of errors
eval(['if outletT ' num2str(5*ii) 'um(number)~=number truth=true; else
truth=false; end']);
if truth==true
disp('ERROR - arrangement length is not coherent');
end
%obtaining mean temperature and range
eval(['summation=ones(1,number)*outletT ' num2str(5*ii) 'um(:,3);']);
mean T=summation/number;
eval(['max T=max(outletT ' num2str(5*ii) 'um(:,3));']);
eval(['min T=min(outletT ' num2str(5*ii) 'um(:,3));']);
middle T=0.5*(max T+min T);
rangeT up=max T-mean T;
rangeT_down=mean T-min T;
rangeT=rangeT up+rangeT down;
%obtaining mean velocity and range
eval(['summation=ones(1,number)*outletV ' num2str(5*ii) 'um(:,3);']);
mean V=summation/number;
eval(['max_V=max(outletV_' num2str(5*ii) 'um(:,3));']);
eval(['min V=min(outletV ' num2str(5*ii) 'um(:,3));']);
middle V=0.5*(max V+min V);
rangeV up=max V-mean V;
rangeV_down=mean V-min V;
rangeV up+rangeV down;
%display
disp(['For ' num2str(5*ii) 'um-particles:']);
disp(['The mean outlet temperature is ' num2str(mean T) '°K and ' 'The mean
outlet velocity is ' num2str(mean_V) 'm/s']);
disp(['The maximun outlet temperature is ' num2str(max T) '°K and ' 'The
maximun outlet velocity is ' num2str(max V) 'm/s']);
disp(['The minimun outlet temperature is ' num2str(min T) ' 'K and ' 'The
minimum outlet velocity is ' num2str(min V) 'm/s']);
disp(' ');
values T=[values T; min T mean T max T];
values V=[values V; min V mean V max V];
clearvars x position velocity temperature;
clearvars i k hf detector n h number;
clearvars rangeV rangeT rangeV up rangeV down rangeT up rangeT down middle T
middle V;
```

clearvars max T max V min T min V mean T mean V summation;

end

```
clearvars truth ii;
clearvars nozzle_length x_distance eps_up eps_down;
```

%PLOT
plottingv2;
%SAVE PLOT
capture;
%SAVE PROCESSED DATA
save('processed data.mat');

Anexo G - Resultados de las simulaciones

G.1 Microtobera N°1

La Microtobera N°1 es la referida con esa numeración en la <u>Tabla 4.7</u>, con 42 mm de largo (sección divergente), 1.3 mm de diámetro de garganta y 2.8 mm de diámetro de salida. El gas de trabajo es 60% Helio (fracción molar).

El campo de velocidades de la Microtobera N°1 se muestra en la Figura G.1.



El campo de temperaturas de la Microtobera N°1 se muestra en la Figura G.2.



La eficiencia de depósito de la Microtobera N°1 se muestra a continuación.



Figura G.3: Velocidad de Impacto y Eficiencia con ingreso a 300 K para la Microtobera N°1



Figura G.4: Temperatura de Impacto con ingreso a 300 K para la Microtobera Nº1

Para ambas gráficas, los valores de los extremos representan máximos y mínimos, mientras que los valores en círculos son promedios del muestreo de datos.

Este resultado es muy interesante y significa que aun cuando no exista precalentado de las partículas, utilizando una mezcla con 60% Helio, desde un punto de vista teórico, puede depositar Cobre con una eficiencia de 90% (el 90% del polvo comercial se deposita en el proceso).

Ahora queda ver el caso en el que las partículas son precalentadas hasta 640 K. Este es un caso extremo y no común en la industria, lo más común es que las partículas entren a temperatura ambiente. Sin embargo, es factibles que las partículas sean calentadas hasta esa temperatura y que se mantengan a esa temperatura si la aguja de inyección es calentada al entrar en contacto con el gas que pasa a través de la garganta. Por esto se evalúa este caso, para así imponer una cota máxima de depósito factible. La <u>Figura G.5</u> y <u>Figura G.6</u> muestran la velocidad de impacto y temperatura de impacto, respectivamente, cuando las partículas ingresan a 640 K.



Figura G.5: Velocidad de Impacto y Eficiencia con ingreso a 640 K para la Microtobera N°1



Figura G.6: Temperatura de Impacto con ingreso a 640 K para la Microtobera N°1

Con este resultado se tiene que desde un punto de vista teórico, es factible obtener una eficiencia de depósito desde 90% (cuando las partículas ingresan a temperatura ambiente) hasta 100% (cuando las partículas ingresan a la temperatura de garganta). Sobre 90% de eficiencia está muy por sobre el estándar en la industria en donde se considera que el proceso de *Cold Spray* como factible cuando se obtiene una eficiencia entre 40% y 50%.

Es decir, para microtoberas cuyo largo sea 42 mm o más, utilizar un gas de trabajo con un 60% Helio es suficiente para obtener un gran rendimiento en el proceso de *Cold Spray* para Cobre.

G.2 Microtobera N°2

La Microtobera N°2 es la referida con esa numeración en la <u>Tabla 4.7</u>, con 45 mm de largo (sección divergente), 1.4 mm de diámetro de garganta y 3.0 mm de diámetro de salida. El gas de trabajo es 28% Helio (fracción molar).

El campo de velocidades de la Microtobera N°2 se muestra en la Figura G.7.



El campo de temperaturas de la Microtobera N°2 se muestra en la Figura G.8.



Para el caso de esta microtobera y las que vienen en adelante, se considera irrelevante mostrar la velocidad y temperatura de las partículas en función de la trayectoria porque las gráficas son esencialmente similares para todos los casos. En su lugar, se muestran de eficiencia de depósito y las velocidades y temperaturas de impacto para cada tamaño de partícula estudiado, como se observa en la Figura G.9 y Figura G.10, respectivamente.



Figura G.9: Velocidad de Impacto y Eficiencia con ingreso a 300 K para la Microtobera N°2

Al observar las temperaturas de impacto en la <u>Figura G.10</u> se puede ver que recién para tamaños superiores a 15 μm se puede observar cierta "inercia térmica" de las partículas.



Figura G.10: Temperatura de Impacto con ingreso a 300 K para la Microtobera N°2

Este resultado es muy importante, pues indica que para una mezlca con 28% Helio y con un largo de microtobera de 45 mm, se puede alcanzar una eficiencia de depósito de 74% aun cuando las partículas ingresan a temperatura ambiente.

A continuación, la <u>Figura G.11</u> y <u>Figura G.12</u> muestran las velocidades de impacto y temperaturas de impacto para cada tamaño de partícula cuando las partículas ingresan a 640 K.



Figura G.11: Velocidad de Impacto y Eficiencia con ingreso a 640 K para la Microtobera N°2

Este resultado indica que es posible obtener una eficiencia de depósito cercana al 100% para una mezcla con 28% Helio. Aunque esto bajo el supuesto de que es factible mantener las partículas precalentadas a 640 K lo cual no es del todo cierto. De cualquier modo, este resultado establece que desde un punto de vista teórico, la cota máxima de eficiencia posible es 100%.

En cuanto a los resultados de la <u>Figura G.12</u>, nótese que ninguna de las partículas es capaz de alcanzar temperatura de impacto mayor a 600 K. Es más, conforme aumenta el tamaño de partícula, la temperatura de impacto se eleva asintóticamente. Esto también se observa en la Microtobera N°1 antes vista.



Figura G.12: Temperatura de Impacto con ingreso a 640 K para la Microtobera N°2

Se puede concluir entonces de que, desde un punto de vista teórico, es factible obtener una eficiencia en el proceso mayor a 70% para microtoberas cuyo largo sea de al menos 45 mm y cuyo gas de trabajo se componga de a lo menos un 28% de Helio.

Aun cuando la Microtobera N°2 es 3 mm más larga que la Microtobera N°1, no puede obtener una eficiencia más alta. Esto se explica porque un mayor porcentaje de Helio genera una mejora sustancial en el proceso. Como se observa al analizar la siguiente microtobera.

G.3 Microtobera N°3

La Microtobera N°3 es la referida con esa numeración en la <u>Tabla 4.7</u>, con 48 mm de largo (sección divergente), 1.3 mm de diámetro de garganta y 3.0 mm de diámetro de salida. El gas de trabajo es 40% Helio (fracción molar).

El campo de velocidades de la Microtobera N°3 se muestra en la Figura G.13.







Las velocidades y temperaturas de impacto para cada tamaño de partícula estudiado, se muestran en la <u>Figura G.15</u> y <u>Figura G.16</u>, respectivamente. Esto para el caso cuando las partículas ingresan a 300 K. Además, en la <u>Figura G.15</u> se muestran las velocidades críticas y la eficiencia de depósito del proceso de *Cold Spray* para este caso.



Figura G.15: Velocidad de Impacto y Eficiencia con ingreso a 300 K para la Microtobera N°3

Al observar las temperaturas de impacto en la <u>Figura G.16</u>, nuevamente se observa que las partículas de 5 μm y 10 μm tienen muy baja "inercia térmica" y sus temperaturas de impacto son incluso menores que la temperatura de impacto de las partículas de 15 μm .



Figura G.16: Temperatura de Impacto con ingreso a 300 K para la Microtobera N°3

Retomando la <u>Figura G.15</u>, se tiene que la eficiencia de depósito factible del proceso es de un 85% lo cual es muy alto. Sin embargo, a pesar de que esta microtobera es 6 mm más larga que la Microtobera N°1, su eficiencia de depósito es un 5% más baja. Esto indica cuán importante es el porcentaje de Helio como parámetro de diseño de las microtoberas.

A continuación, la <u>Figura G.17</u> y <u>Figura G.18</u> muestran las velocidades de impacto y temperaturas de impacto para cada tamaño de partícula cuando las partículas ingresan a 640 K.



Figura G.17: Velocidad de Impacto y Eficiencia con ingreso a 640 K para la Microtobera N°3

Este resultado indica que al igual que en los casos anteriores y nuevamente desde un punto de vista teórico, es posible obtener una eficiencia de depósito de 100% en el proceso. Sin embargo, esto es posible solo si se logra mantener las partículas precalentadas a 640 K.

En cuanto a los resultados de la <u>Figura G.18</u>, al igual que en casos anteriores, ninguna de las partículas es capaz de alcanzar temperatura de impacto mayor a 600 K y conforme aumenta el tamaño de partícula, la temperatura de impacto se eleva asintóticamente.



Figura G.18: Temperatura de Impacto con ingreso a 640 K para la Microtobera N°3

Se puede concluir entonces que el porcentaje de Helio es un parámetro de diseño que resulta ser más relevante incluso que el largo de tobera. Sin embargo, el precalentado de las partículas también puede aumentar considerablemente la eficiencia del proceso.

Este resultado es positivo, pues significa que si se acorta el largo de las microtoberas, aún existe como alternativa aumentar la proporción de Helio o precalentar las partículas para seguir manteniendo una alta eficiencia del proceso.

G.4 Microtobera N°4

En este caso, se considera una disminución drástica del porcentaje de Helio en el gas trabajo y en el largo de la microtobera.

La Microtobera N°4 es la referida con esa numeración en la <u>Tabla 4.7</u>, con 40 mm de largo (sección divergente), 1.2 mm de diámetro de garganta y 2.6 mm de diámetro de salida. El gas de trabajo es 20% Helio (fracción molar).

El campo de velocidades de la Microtobera Nº4 se muestra en la Figura G.19.



El campo de temperaturas de la Microtobera N°4 se muestra en la Figura G.20.



Las velocidades y temperaturas de impacto para cada tamaño de partícula estudiado se muestran en la <u>Figura G.21</u> y <u>Figura G.22</u>, respectivamente. Esto para el caso cuando las partículas ingresan a 300 K. Además, en la <u>Figura G.21</u> se muestran las velocidades críticas y la eficiencia de depósito del proceso de *Cold Spray* para este caso.



Figura G.21: Velocidad de Impacto y Eficiencia con ingreso a 300 K para la Microtobera N°4

Al observar las temperaturas de impacto en la Figura G.22, se ve que la falta de "inercia térmica" afecta mayormente a las partículas de 5 μm de diámetro. Las temperaturas del impacto promedio están en un rango entre 390 K y 340 K. Si se considera todo el muestreo, el rango se amplía a entre 440 K y 335 K.



Figura G.22: Temperatura de Impacto con ingreso a 300 K para la Microtobera N°4

Respecto a la <u>Figura 4.80</u>, se tiene que la eficiencia de depósito factible del proceso es de un 40% lo cual es mucho más baja que las eficiencias vistas en las microtoberas antes mencionadas. Esto se puede explicar por el efecto combinado de la reducción del largo de la microtobera y del porcentaje de Helio del gas de trabajo.

A continuación, la <u>Figura G.23</u> y <u>Figura G.24</u> muestran las velocidades de impacto y temperaturas de impacto para cada tamaño de partícula cuando las partículas ingresan a 640 K.


Figura G.23: Velocidad de Impacto y Eficiencia con ingreso a 640 K para la Microtobera N°4

Por primera vez se tiene que aun planteando el caso ideal en que las partículas son precalentadas e ingresan a la temperatura de garganta (máxima temperatura admisible) se tiene que no es factible desde un punto de vista teórico alcanzar un 100 % de eficiencia de depósito. En efecto, la máxima eficiencia posible es 83%.

En cuanto a los resultados de la <u>Figura G.24</u>, al igual que en casos anteriores, ninguna de las partículas es capaz de alcanzar temperatura de impacto mayor a 600 K y conforme aumenta el tamaño de partícula, la temperatura de impacto se eleva asintóticamente.



Figura G.24: Temperatura de Impacto con ingreso a 640 K para la Microtobera N°4

Se puede concluir que para toberas cuyo largo es 40 mm, utilizar un gas compuesto por un 20% de Helio es apenas suficiente para que el proceso sea factible desde un punto de vista teórico (por apenas factible entiéndase por eficiencia entre un 40% y 50% sin precalentado).

Esto significa que para reducir la proporción de Helio hasta un 20% se hace necesario probar con largos mayores a 40 mm. Es decir, se establece una cota mínima para el largo de las microtoberas que operan con mezclas 20% Helio.

G.5 Microtobera N°5

Esta tobera es el resultado de una optimización numérica luego de imponer un 20% Helio para la mezcla que compone al gas de trabajo. Al igual que el caso de la Microtobera N°4. La diferencia es que en este caso se relaja el criterio de la presión de salida y se admite como presión de 0.6 bar como presión mínima. Como resultado de esta optimización, la Microtobera N°5 es más larga que la microtobera anterior por 2 mm (42 mm de largo), con 1.2 mm de diámetro de garganta y 2.6 mm de diámetro de salida. Naturalmente el gas de trabajo es 20% Helio (fracción molar).



El campo de velocidades de la Microtobera N°5 se muestra en la Figura G.25.

El campo de temperaturas de la Microtobera N°5 se muestra en la Figura G.26.



Las velocidades y temperaturas de impacto para cada tamaño de partícula estudiado se muestran en la <u>Figura G.27</u> y <u>Figura G.28</u>, respectivamente. Esto para el caso cuando las partículas ingresan a 300 K. Además, en la <u>Figura G.27</u> se muestran las velocidades críticas y la eficiencia de depósito del proceso de *Cold Spray* para este caso.



Figura G.27: Velocidad de Impacto y Eficiencia con ingreso a 300 K para la Microtobera N°5

Al observar las temperaturas de impacto en la Figura G.27, se ve que la falta de "inercia térmica" afecta mayormente a las partículas de 5 μm de diámetro. Las temperaturas del impacto promedio están en un rango entre 390 K y 340 K. Si se considera todo el muestreo, el rango se amplía a entre 460 K y 335 K.



Figura G.28: Temperatura de Impacto con ingreso a 300 K para la Microtobera N°5

Respecto a la <u>Figura G.28</u>, se tiene que la eficiencia de depósito factible del proceso es de un 46%. Es decir, el efecto combinado de relajar el criterio de presión mínima de 0.8 bar a 0.6 bar, más alargar el largo de la microtobera de 40 mm a 42 mm tiene como resultado una mejora en el rendimiento del proceso de un 6%. Esto sigue siendo bajo si se compara a la Microtobera N°1, que para un mismo largo y presión de salida, utilizando una mezcla con 60% Helio, alcanza una eficiencia de depósito entre un 90% y un 100%.

A continuación, la <u>Figura G.29</u> y <u>Figura G.30</u> muestran las velocidades de impacto y temperaturas de impacto para cada tamaño de partícula cuando las partículas ingresan a 640 K.



Figura G.29: Velocidad de Impacto y Eficiencia con ingreso a 640 K para la Microtobera N°5

Nuevamente se tiene que incluso en un caso ideal en el que las partículas entran a la temperatura de garganta (640 K), no es factible desde un punto de vista teórico alcanzar un 100% de eficiencia. La eficiencia máxima factible en este caso es 88%.

En cuanto a los resultados de la <u>Figura G.30</u>, al igual que en casos anteriores, ninguna de las partículas es capaz de alcanzar temperatura de impacto mayor a 600 K y conforme aumenta el tamaño de partícula, la temperatura de impacto se eleva asintóticamente.



Figura G.30: Temperatura de Impacto con ingreso a 640 K para la Microtobera N°5

En este caso se tiene que para una microtobera cuyo largo es 42 mm, el proceso sigue siendo apenas factible (eficiencia apenas sobre 40% sin precalentado). Bajo estas condiciones de diseño entonces se hace necesario precalentar las partículas para obtener una mayor eficiencia de depósito.

De acuerdo a lo observado con la Microtobera N°4 y la Microtobera N° 5, si se impone un gas de trabajo con 20% Helio, el largo de tobera mínimo admisible es 40 mm, y aun así, se requiere precalentar las partículas para obtener una eficiencia aceptable.

G.6 Microtobera N°6

Se desea evaluar un gas de trabajo con 10% Helio y una presión de salida de 0.6 bar. Esta tobera es referida como Microtobera N°6 de acuerdo a la enumeración de la <u>Tabla 4.7</u> y tiene un largo de 37 mm, un diámetro de garganta de 1.1 mm y un diámetro de salida de 2.4 mm.

El campo de velocidades de la Microtobera N°6 se muestra en la Figura G.31.







Las velocidades y temperaturas de impacto para cada tamaño de partícula estudiado se muestran en la <u>Figura G.33</u> y <u>Figura G.34</u>, respectivamente. Esto para el caso cuando las partículas ingresan a 300 K. Además, en la <u>Figura G.33</u> se muestran las velocidades críticas y la eficiencia de depósito del proceso de *Cold Spray* para este caso.



Figura G.33: Velocidad de Impacto y Eficiencia con ingreso a 300 K para la Microtobera N°6

Nótese que esta microtobera es más corta que todas las anteriores. En la <u>Figura G.34</u> se observa que las temperaturas promedios varían entre 400 K y 340 K, mientras que incluyendo todo el muestreo, las temperaturas de impacto varían entre 470 K y 340 K aproximadamente.



Figura G.34: Temperatura de Impacto con ingreso a 300 K para la Microtobera N°6

Retomando la <u>Figura G.33</u>, se tiene que la eficiencia de depósito factible del proceso es de un 27%. Esto es muy bajo, y conlleva inmediatamente a descartar esta microtobera para cualquier proceso de *Cold Spray* con Cobre. La reducción del largo de la microtobera y el porcentaje de Helio son la explicación para esta reducción en la eficiencia de depósito.

A continuación, la <u>Figura G.35</u> y <u>Figura G.36</u> muestran las velocidades de impacto y temperaturas de impacto para cada tamaño de partícula cuando las partículas ingresan a 640 K.



Figura G.35: Velocidad de Impacto y Eficiencia con ingreso a 640 K para la Microtobera N°6

En este caso, a pesar de que las partículas ingresan a 640 K, la eficiencia de depósito es de solo un 64 % lo que es muy bajo considerando que este es solo un caso teórico y por lo general las partículas ingresan a temperatura ambiente a la microtobera. Con esto ya se puede dar por descartada esta microtobera para cualquier uso con Cobre.

En cuanto a los resultados de la <u>Figura G.36</u>, al igual que en casos anteriores, ninguna de las partículas es capaz de alcanzar temperatura de impacto mayor a 600 K y conforme aumenta el tamaño de partícula, la temperatura de impacto se eleva asintóticamente.



Figura G.36: Temperatura de Impacto con ingreso a 640 K para la Microtobera N°6

En definitiva, se deduce que la microtobera no es compatible con el proceso. La razón puede ser la reducción del porcentaje de Helio y la reducción del largo de la microtobera.

Aun cuando la microtobera es descartable, nuevamente se observa el gran incremento en la eficiencia del proceso cuando las partículas son precalentadas.

G.7 Microtobera N°7

Para las dos microtoberas que quedan (Microtobera N°7 y Microtobera N°8) se evalúa el caso con Nitrógeno puro (sin Helio). En cuanto a la Microtobera N°7, su largo de sección divergente es de 48 mm, diámetro de garganta 1.2 y diámetro de salida 2.9 mm.

El campo de velocidades de la Microtobera N°7 se muestra en la Figura G.37.







Las velocidades y temperaturas de impacto para cada tamaño de partícula estudiado se muestran en la <u>Figura G.39</u> y <u>Figura G.40</u>, respectivamente. Esto para el caso cuando las partículas ingresan a 300 K. Además, en la <u>Figura G.39</u> se muestran las velocidades críticas y la eficiencia de depósito del proceso de *Cold Spray* para este caso.



Figura G.39: Velocidad de Impacto y Eficiencia con ingreso a 300 K para la Microtobera N°7

Nótese que esta microtobera junto con la Microtobera N°3 son las más largas evaluadas en este trabajo (48 mm de sección divergente). En este caso, la eliminación del Helio (uso de Nitrógeno puro) significa una disminución significativa en la eficiencia de depósito. Si bien un 39% de eficiencia está bajo el rango considerado admisible, se abre la posibilidad de que al calentar las partículas, el proceso puede alcanzar una eficiencia mayor al 40%.



Figura G.40: Temperatura de Impacto con ingreso a 300 K para la Microtobera N°7

Con respecto a la <u>Figura G.40</u>, se observa un rango de temperaturas de impacto similar a los casos anteriores. Esto indica que para las partículas mayores a 15 μ m, es decir, las que poseen cierta "inercia térmica" la principal condicionante de la temperatura de impacto es la temperatura inicial de la partícula, y no el gas de trabajo o el largo de la tobera como se podría creer en principio. Este es un resultado positivo, pues indica que precalentando las partículas se tiene un control directo sobre la temperatura de impacto de las partículas y así sobre la eficiencia de depósito.

A continuación, la <u>Figura G.41</u> y <u>Figura G.42</u> muestran las velocidades de impacto y temperaturas de impacto para cada tamaño de partícula cuando las partículas ingresan a 640 K.



Figura G.41: Velocidad de Impacto y Eficiencia con ingreso a 640 K de la Microtobera N°7

La eficiencia del proceso mejora significativamente si la temperatura de ingreso de las partículas es de 640 K. Esto se debe a que el perfil de velocidad crítica generado decrece casi en paralelo con las velocidades de impacto.

En cuanto a los resultados de la <u>Figura G.42</u>, al igual que en casos anteriores, ninguna de las partículas es capaz de alcanzar temperatura de impacto mayor a 600 K y conforme aumenta el tamaño de partícula, la temperatura de impacto se eleva asintóticamente. Entonces, se observa que la temperatura de impacto es fuertemente dependiente de la temperatura inicial de la partícula y no de las condiciones de operación particulares de la microtobera.



Figura G.42: Temperatura de Impacto con ingreso a 640 K para la Microtobera N°7

En definitiva, se muestra que el proceso de *Cold Spray* para Cobre es factible empleado únicamente Nitrógeno, pero solo bajo ciertas condiciones. La primera es que el largo de la microtobera debe ser de al menos 48 mm. La segunda es que necesariamente las partículas deben ser precalentadas, para permitir que la eficiencia del proceso alcance algún punto intermedio entre 37% y 89%, que es la eficiencia mínima y máxima, respectivamente.

G.8 Microtobera N°8

La última microtobera estudiada es la Microtobera N°8, que también utiliza Nitrógeno puro como gas de trabajo, tiene un largo de 37 mm, un diámetro de garganta de 1.1 mm y un diámetro de salida de 2.4 mm. Esta microtobera es mucho más corta que la Microtobera N°7, que tiene resultados al borde del límite de la admisible, en cuanto a eficiencia.



El campo de velocidades de la Microtobera N°8 se muestra en la Figura G.43.





Las velocidades y temperaturas de impacto para cada tamaño de partícula estudiado se muestran en la <u>Figura G.45</u> y <u>Figura G.46</u>, respectivamente. Esto para el caso cuando las partículas ingresan a 300 K. Además, en la <u>Figura G.45</u> se muestran las velocidades críticas y la eficiencia de depósito del proceso de *Cold Spray* para este caso.



Figura G.45: Velocidad de Impacto y Eficiencia con ingreso a 300 K para la Microtobera N°8

Nótese que esta microtobera junto con la Microtobera N°6 son las más cortas evaluadas en este trabajo (37 mm de sección divergente). En este caso, la eliminación del Helio (uso de Nitrógeno puro) significa una disminución significativa en la eficiencia de depósito. Una eficiencia de depósito de 15% significa que la microtobera no es compatible para el proceso bajo ningún punto de vista.



Figura G.46: Temperatura de Impacto con ingreso a 300 K para la Microtobera N°8

Con respecto a la <u>Figura G.46</u>, no hay mucho diferencia entre las temperaturas de impacto que se observan en este caso y las que se ven en las otras toberas que son más largas y que tienen configuraciones diferentes, ratificando de que la temperatura de impacto no depende fuertemente de la geometría de la microtobera.

A continuación, la <u>Figura G.47</u> y <u>Figura G.48</u> muestran las velocidades de impacto y temperaturas de impacto para cada tamaño de partícula cuando las partículas ingresan a 640 K.



Figura G.47: Velocidad de Impacto y Eficiencia con ingreso a 640 K para la Microtobera N°8

Incluso con las partículas entrando a 640 K, apenas se alcanza una eficiencia de 56%, lo cual es muy bajo considerando que las partículas han sido calentadas a la máxima temperatura admisible. Con este resultado se da por descartada esta microtobera.

Nótese que la Microtobera N°6 y Microtobera N°8 tienen la misma geometría. Y en ambos casos la eficiencia obtenida es muy baja, lo que significa que es descartable para Cobre el proceso de *Cold Spray* con microtoberas de 37 mm y con un gas de trabajo bajo en Helio.

Respecto a las temperaturas de impacto, se tiene el mismo patrón visto en las microtoberas anteriores. Las partículas de 45 μm apenas alcanzan una temperatura de 600 K.



Figura G.48: Temperatura de Impacto con ingreso a 640 K para la Microtobera N°8

En definitiva, se tiene que para un gas de trabajo con bajo porcentaje de Helio, no es factible el empleo de microtoberas cuyo largo sea 37 mm. Tanto esta tobera (Microtobera N°8) como la Microtobera N°6 quedan descartada para el proceso.