SOLUCIÓN DEL PROBLEMA TERMOMECÁNICO ACOPLADO EN COLADA CONTINUA DE REDONDOS DE ACERO

Víctor D. Fachinotti, Alberto Cardona, Alfredo E. Huespe

Centro Internacional de Métodos Computacionales en Ingeniería Instituto de Desarrollo Tecnológico para la Industria Química Güemes 3450, C.P. 3000, Santa Fe, ARGENTINA

RESUMEN

Este trabajo propone un modelo de elementos finitos para resolver problemas en que los campos de tensiones y temperaturas están acoplados, con énfasis en la colada continua de aceros. Se desarrolla un esquema monolítico de acoplamiento, cuya solución se encara mediante la técnica de Newton-Raphson. La matriz tangente general es particionada de modo de aprovechar las matrices tangentes de los problemas individuales, debiéndose calcular sólo los términos de acoplamiento. Se emplea una descripción Lagrangiana del problema mecánico que facilita la integración de las ecuaciones de evolución del flujo inelástico. Se desarrolla también un algoritmo para considerar la advección del material manteniendo la malla fija, el cual es evaluado al final del artículo.

ABSTRACT

This work proposes a finite element model to solve problems where stress and temperature fields are coupled, with emphasis on the continuous casting of steels. We develop a monolithic coupling scheme, whose solution is carried out using the Newton-Raphson technique. The general tangent matrix is split in such a way to utilise the tangent matrices from the individual problems, requiring to compute only the coupling terms. A Lagrangian description of the mechanical problem is applied, which facilitates the integration of the evolution equations of the plastic flow. We also develop an algorithm to take into account material advection maintaining a fixed mesh, which is evaluated at the end of the article.

INTRODUCCIÓN

Nos proponemos simular las etapas iniciales del proceso de colada continua de barras cilíndricas de acero de sección circular, en adelante llamadas simplemente tochos. Se supone que el proceso ha alcanzado su régimen de operación normal adoptando la hipótesis de estacionaridad. Por lo tanto, fenómenos eminentemente transitorios como la formación de marcas de oscilación, quedan fuera de los propósitos del presente artículo. El problema a resolver involucra entonces la solidificación del metal colado a su paso por un molde de cobre refrigerado y a continuación por una serie de sprays de agua.

Los mecanismos de transferencia de calor difieren según se considere el tocho o el molde, los dos elementos principales de esta etapa del proceso. En el molde, que se mantiene en estado sólido a lo largo del proceso, el calor se transmite por conducción. En el tocho, el cambio de fase juega un papel preponderante. En este caso, se presenta adicionalmente convección por el movimiento de las partículas en la pileta líquida. Y al ser dicho movimiento turbulento, favorece la transferencia de calor.

La contracción que experimenta el tocho al enfriarse, sumada a la distorsión del molde al calentarse, da lugar a la formación de un intersticio gaseoso o *gap* que altera considerablemente el flujo calórico en esa interfase. Este gap es responsable de la fuerte influencia del campo de desplazamientos en el análisis térmico.

El modelo puede simplificarse, como sucede en la aplicación que presentamos, si se conoce a priori el intercambio de calor entre el tocho y su entorno.

PROBLEMA TÉRMICO

Consideremos el problema general de conducción-convección de calor con cambio de fase. Sea Ω la clausura del dominio en estudio y $\partial\Omega$ su frontera, la cual se halla dividida en porciones no solapadas $\partial\Omega_T$, $\partial\Omega_q$ y $\partial\Omega_c$ en las que se han impuesto condiciones de temperatura, flujo calórico y convección a un fluido exterior, respectivamente. En forma débil, este problema está gobernado por la ecuación

$$\int_{\Omega} \nabla W \cdot (\boldsymbol{\kappa} \cdot \nabla T) \, dv + \int_{\Omega} W \left(\rho c + \rho L \frac{df_l}{dT} \right) \mathbf{V} \cdot \nabla T \, dv - \int_{\partial \Omega_q} W \hat{q} \, ds - \int_{\partial \Omega_c} W h(T_{\infty} - T) \, ds = 0, \quad (1)$$

siendo T el campo de temperaturas que se desea calcular, W una función de peso tal que se satisfaga la condición de temperatura prescrita en $\partial\Omega_T$, $\kappa = \kappa(T)$ el tensor de conductividad térmica, \mathbf{V} el campo de velocidades, $\rho c = \rho c(T)$ la capacidad calorífica, ρL el calor latente de solidificación (ρ denota la densidad del material, de modo que ρc y ρL constituyen cantidades volumétricas), $f_l = f_l(T)$ la fracción líquida, \hat{q} el flujo de calor a través de $\partial\Omega_q$ y h = h(T) el coeficiente de convección de calor a un fluido externo a temperatura T_{∞} .

Al aplicar el método de los elementos finitos (MEF), el campo de temperaturas es aproximado por la expresión

$$T \approx N_i T_i = \mathbf{N}^T \mathbf{T}, \quad i = 1, 2, \cdots, N = \text{número de nodos},$$
 (2)

donde T_i es la temperatura del nodo *i*, al que se encuentra asociada la función de forma N_i ; **T** y **N** son sus respectivos arreglos vectoriales.

En cuanto a las funciones de peso W, la opción estándar en MEF es adoptar como tales las mismas funciones de forma N_i (método de Galerkin). Su aplicación conduce a subestimar la difusión en problemas con convección dominante. Surge entonces la necesidad de recurrir a funciones de peso tipo Petrov-Galerkin, esto es $W \neq N_i$. En particular, la técnica SUPG (Streamline Upwind Petrov-Galerkin¹) propone

$$W = N_i + \tilde{W}_i,$$

siendo W_i un término de peso adicional en la dirección de las líneas de corriente. Esta alternativa es la que hemos implementado en trabajos anteriores.²

Tras introducir la aproximación (2) y ponderar mediante N funciones de peso W, sean del tipo Galerkin o Petrov-Galerkin, la ecuación integral (1) se transforma en un sistema no lineal de N ecuaciones con Nincógnitas, que expresamos como

$$\boldsymbol{\psi}^{t}(\mathbf{T}, \mathbf{U}) = \mathbf{P}^{t}(\mathbf{T}) - \mathbf{F}^{t}(\mathbf{T}, \mathbf{U}) = \mathbf{0},$$
(3)

donde \mathbf{P}^t es la suma de los dos primeros términos de la ecuación (1), representando el flujo interno de calor, y \mathbf{F}^t comprende los términos de frontera. La no linealidad de este sistema con respecto a la temperatura se debe al carácter termodependiente de las propiedades térmicas como la conductividad, la capacidad calorífica y el coeficiente de convección.

El vector \mathbf{U} , solución del problema mecánico que se plantea en la siguiente sección, contiene los desplazamientos nodales. El desplamiento relativo entre el tocho y el molde, que eventualmente se separan alterando el flujo calórico, explica la dependencia funcional que muestra \mathbf{F}^t en la expresión (3).

PROBLEMA MECÁNICO

Supongamos un cuerpo deformado por la acción de fuerzas externas que actúan ya sea en forma de fuerzas **b** distribuidas en toda la masa del cuerpo (por ejemplo, su peso propio) o bien como tracciones \bar{t} repartidas en la región $\partial \Omega_{\sigma}$ del contorno (tal es el caso de la presión ferrostática en la colada continua). La equivalencia

estática entre estas fuerzas externas y las tensiones σ actuantes en la masa del cuerpo se establece por medio del principio de los trabajos virtuales

$$\int_{\Omega} \boldsymbol{\sigma} : \delta \boldsymbol{\varepsilon} \, dv = \int_{\Omega} \mathbf{b} \cdot \delta \mathbf{u} \, dv + \int_{\partial \Omega_{\sigma}} \bar{\mathbf{t}} \cdot \delta \mathbf{u} \, ds, \tag{4}$$

esto es la igualdad entre el trabajo realizado por las tensiones y las cargas externas para un incremento virtual $\delta \mathbf{u}$ del campo de desplazamientos \mathbf{u} y el consiguiente incremento $\delta \boldsymbol{\varepsilon}$ del campo de deformaciones $\boldsymbol{\varepsilon} = \nabla^s \mathbf{u}$.

Modelo de comportamiento del material

El comportamiento del acero a altas temperaturas se caracteriza por el flujo irreversible del material. Decimos que un material es plástico si dicho flujo es prácticamente insensible a la tasa de deformación. En caso contrario, el material es viscoplástico. Sea una u otra respuesta, se asumen las siguientes hipótesis:

• Las deformaciones son pequeñas, siendo válida su descomposión aditiva en una parte elástica (reversible) ε^e y otra inelástica (irreversible) ε^{in} , o sea:

$$\boldsymbol{\varepsilon} = \boldsymbol{\varepsilon}^e + \boldsymbol{\varepsilon}^{in}.$$
 (5)

• Las tensiones se definen por la ley de Hooke generalizada con un término inducido por el gradiente de temperaturas:

$$\boldsymbol{\sigma} = \mathbf{C} : \boldsymbol{\varepsilon}^e - 3\kappa \hat{\beta} \mathbf{l},\tag{6}$$

donde $\mathbf{C} = \mathbf{C}(T)$ es el módulo elástico, tensor simétrico de cuarto orden dado por

$$\mathbf{C} = \lambda \mathbf{l} \otimes \mathbf{l} + 2\mu \mathbf{I},$$

con l y I como los tensores identidad de segundo y cuarto orden, respectivamente; $\lambda = \lambda(T)$ y $\mu = \mu(T)$ son los coeficientes elásticos de Lamé, $\kappa = \lambda + \frac{2}{3}\mu$ es el módulo de compresibilidad y $\hat{\beta} = \hat{\beta}(T)$ es la función de expansión térmica lineal:

$$\hat{\beta}(T) = \int_{T_{ref}}^{T} \beta(\theta) \, d\theta$$

siendo $\beta = \beta(T)$ el coeficiente de expansión térmica lineal y T_{ref} una temperatura de referencia.

• Se adopta el criterio de fluencia de von Mises

$$f(\boldsymbol{\sigma}, R) = \|\mathbf{s}\| - \sqrt{\frac{2}{3}} \left(R + \sigma_Y\right), \qquad (7)$$

siendo $\mathbf{s} = \operatorname{dev}(\boldsymbol{\sigma})$, R una variable interna que caracteriza el estado de endurecimiento (isotrópico) del material en el espacio de tensiones y σ_Y la tensión inicial de fluencia o límite elástico.

• La evolución de las variables internas responde a las leyes asociativas:

$$\dot{\boldsymbol{\varepsilon}}^p = \gamma \frac{\partial f}{\partial \boldsymbol{\sigma}} = \gamma \mathbf{n}, \tag{8}$$

$$\dot{\alpha} = -\gamma \frac{\partial f}{\partial R} = \sqrt{\frac{2}{3}}\gamma, \tag{9}$$

donde γ es el parámetro de consistencia, $\mathbf{n} = \mathbf{s}/\|\mathbf{s}\|$ y α es la variable interna termodinámicamente conjugada con R en el espacio de deformaciones, definida aquí como la deformación inelástica acumulada en un período de tiempo [0, t]:

$$\alpha = \int_0^t \sqrt{\frac{2}{3}} \| \dot{\boldsymbol{\varepsilon}}^p(\tau) \| \, d\tau$$

Las ecuaciones (8) y (9), que definen las tasas de ε^p y α , se conocen como regla de flujo y ley de endurecimiento, respectivamente.

Además, el parámetro de consistencia γ es una función no negativa que debe satisfacer:

- Condición de complementariedad de Kuhn-Tucker:

$$\gamma f(\boldsymbol{\sigma}, R) = 0.$$

- Condición de consistencia:

$$\gamma f(\boldsymbol{\sigma}, R) = 0.$$

En caso de comportamiento tasa-dependiente es preciso definir una ley constitutiva para el parámetro de consistencia γ . Recurrimos en este trabajo al modelo de Perzyna:

$$\gamma = \frac{1}{\eta}g(f),\tag{10}$$

donde $\eta = \eta(T) > 0$ es una propiedad del material conocida como viscosidad y g(f) es una función monótona creciente tal que g(f) = 0 sólo si $f \leq 0$.

Modelo viscoplástico para aceros a altas temperaturas. Para describir el comportamiento del acero en el rango austenítico (aproximadamente, de $950^{\circ}C$ a $1400^{\circ}C$), Kozlowski el al.³ proponen la siguiente ley:

$$\dot{\alpha} = C \exp \frac{-Q}{T} (\sigma_{eq} - A_{\varepsilon} \alpha^{N_{\varepsilon}})^N, \tag{11}$$

donde C = C(c) es un factor de escala que tiene en cuenta la influencia del contenido de carbono c del acero, Q es la energía de activación, $\sigma_{eq} = \sqrt{\frac{3}{2}} \|\mathbf{s}\|$ es la tensión equivalente de Von Mises y N = N(T), $A_{\varepsilon} = A_{\varepsilon}(T)$ y $N_{\varepsilon} = N_{\varepsilon}(T)$ son propiedades del material.

Este modelo constituye un caso particular de la formulación presentada, donde:

$$R = A_{\varepsilon} \alpha^{N_{\varepsilon}},$$

$$\sigma_{Y} = 0,$$

$$g = \left(\frac{2}{3}\right)^{\frac{N+1}{2}} f^{N},$$

$$\eta = C^{-1} \exp \frac{Q}{T}.$$

Discretización temporal

Suponiendo conocidas las variables internas en el instante t_n , se trata de actualizarlas para el instante $t_{n+1} = t_n + \Delta t$ ante un incremento $\Delta \mathbf{u}$ del campo de desplazamientos. El campo de deformaciones totales tras el incremento $\Delta \mathbf{u}$ resulta trivialmente

$$\boldsymbol{\varepsilon}_{n+1} = \boldsymbol{\varepsilon}_n + \nabla^s(\Delta \mathbf{u}),\tag{12}$$

con el subíndice denotando el instante de evaluación.

Aproximando las ecuaciones de tasa (8-9) en diferencias finitas hacia atrás (esto es, el esquema de primer orden implícito de Euler-backward), las variables internas en t_{n+1} están dadas por:

$$\boldsymbol{\varepsilon}_{n+1}^p = \boldsymbol{\varepsilon}_n^p + \Delta \gamma \mathbf{n}_{n+1}, \tag{13}$$

$$\alpha_{n+1} = \alpha_n + \sqrt{\frac{2}{3}}\Delta\gamma, \tag{14}$$

 $\operatorname{con}\,\Delta\gamma=\gamma_{n+1}\Delta t.$

Las ecuaciones (12) y (13) determinan las deformaciones elásticas $\boldsymbol{\varepsilon}_{n+1}^e = \boldsymbol{\varepsilon}_{n+1} - \boldsymbol{\varepsilon}_{n+1}^p$, y con ello las tensiones:

$$\boldsymbol{\sigma}_{n+1} = \mathbf{C}_{n+1} : \boldsymbol{\varepsilon}_{n+1}^e - 3\kappa_{n+1}\hat{\beta}_{n+1}\mathbf{l}.$$
(15)

Discretización espacial

Para aplicar el MEF, los componentes cartesianos de los tensores de segundo orden, como tensiones y deformaciones, se reordenan en vectores, mientras que los de cuarto orden, como el módulo elástico, son representados por matrices. Para el estado axisimétrico de tensiones, la convención resulta:

$$\boldsymbol{\sigma} = \begin{bmatrix} \sigma_{11} \\ \sigma_{22} \\ \sigma_{12} \\ \sigma_{33} \end{bmatrix}, \quad \boldsymbol{\varepsilon} = \begin{bmatrix} \varepsilon_{11} \\ \varepsilon_{22} \\ 2\varepsilon_{12} \\ \varepsilon_{33} \end{bmatrix}, \quad \mathbf{C} = \begin{bmatrix} C_{1111} & C_{1122} & C_{1112} & C_{1133} \\ & C_{2222} & C_{2212} & C_{2233} \\ & & C_{1212} & C_{1233} \\ & & \text{simétrica} & & C_{3333} \end{bmatrix},$$

con los subíndices 1, 2 y 3 refiriendo a las coordenadas radial r, axial z y circunferencial t, respectivamente. Siguiendo el procedimiento de discretización por MEF, el campo de desplazamientos **u** se aproxima como

$$\mathbf{u} \approx N_i \mathbf{u}_i = \mathbf{N}^T \mathbf{U}, \quad i = 1, 2, \cdots, M = \text{número de nodos},$$
 (16)

siendo **U** es el vector de desplazamientos nodales \mathbf{u}_i ; en general, las funciones de forma N_i serán diferentes a las usadas para definir el campo de temperaturas, ecuación (2), así como también variará la forma de subdividir el dominio y por tanto, el número de nodos.

Con el desplazamiento dado por la expresión (16), la deformación toma la forma algorítmica $\varepsilon = \mathbf{BU}$. Luego, teniendo en cuenta que $\delta \mathbf{U}$ es una variación arbitraria, del principio de los trabajos virtuales se deduce la ecuación de equilibrio discreta:

$$\boldsymbol{\psi}^{m}(\mathbf{T}, \mathbf{U}) = \mathbf{P}^{m}(\mathbf{T}, \mathbf{U}) - \mathbf{F}^{m}(\mathbf{T}, \mathbf{U}) = \mathbf{0}, \tag{17}$$

con los vectores de fuerzas internas y externas definidos por:

$$\mathbf{P}^{m}(\mathbf{T}, \mathbf{U}) = \int_{\Omega} \mathbf{B}^{T} \boldsymbol{\sigma} \, dv,$$
$$\mathbf{F}^{m}(\mathbf{T}, \mathbf{U}) = \int_{\Omega} \mathbf{N}^{T} \mathbf{b} \, dv + \int_{\partial \Omega_{\sigma}} \mathbf{N}^{T} \bar{\mathbf{t}} \, ds,$$

respectivamente.

La solución del problema térmico afecta las tensiones (y por ende, las fuerzas internas \mathbf{P}^m) al alterar las propiedades mecánicas del material. A su vez, determina la región sobre la que actúa la presión ferrostática, influyendo de esta manera sobre las cargas \mathbf{F}^m .

ACOPLAMIENTO TERMOMECÁNICO

Con anterioridad hemos llevado a la práctica un esquema de acoplamiento escalonado,⁴ resolviendo una sucesión de pasos termomecánicos, cada uno de los cuales consiste de: i) análisis mecánico isotérmico y ii) analisis térmico a configuración fija.

En este trabajo, nos proponemos indagar el rendimiento de un esquema monolítico, para lo cual introducimos un vector de incógnitas generalizadas $\mathbf{V} = [\mathbf{T}, \mathbf{U}]$. Ahora, la solución del problema termo-mecánico acoplado definido por el sistema de ecuaciones (3) y (17) consiste en la minimización del residuo generalizado $\Psi = [\boldsymbol{\psi}^t, \boldsymbol{\psi}^m]$, medido en una cierta norma.

La técnica de Newton-Raphson proporciona la manera más eficiente de resolver la ecuación no lineal $\Psi(\mathbf{V})$ =

0, dada su tasa de convergencia cuadrática. Se aproxima el residuo en la iteración i + 1 por la expansión de Taylor de primer orden

$$\Psi(\mathbf{V}^{(i+1)}) \approx \Psi(\mathbf{V}^{(i)}) + \mathbf{K}(\mathbf{V}^{(i)})(\mathbf{V}^{(i+1)} - \mathbf{V}^{(i)}) = \mathbf{0},$$
(18)

donde \mathbf{K} designa la derivada del residuo con respecto a la variable incógnita, también conocida como matriz jacobiana o tangente, dada por:

$$\mathbf{K} = rac{d \mathbf{\Psi}}{d \mathbf{V}} = \left[egin{array}{c} \mathbf{K}^t & rac{\partial \boldsymbol{\psi}^t}{\partial \mathbf{U}} \ \hline rac{\partial \boldsymbol{\psi}^m}{\partial \mathbf{T}} & \mathbf{K}^m \end{array}
ight],$$

donde $\mathbf{K}^t = \frac{\partial \boldsymbol{\psi}^t}{\partial \mathbf{T}}$ y $\mathbf{K}^m = \frac{\partial \boldsymbol{\psi}^m}{\partial \mathbf{U}} = \frac{\partial \mathbf{P}^m}{\partial \mathbf{U}}$ son las matrices jacobianas térmica y mecánica, respectivamente. Los términos cruzados $\frac{\partial \boldsymbol{\psi}^t}{\partial \mathbf{U}} = -\frac{\partial \mathbf{F}^t}{\partial \mathbf{U}}$ y $\frac{\partial \boldsymbol{\psi}^m}{\partial \mathbf{T}}$ aparecen por el acoplamiento de las soluciones. Por lo tanto, podemos aprovechar los códigos ya implementados para resolver los problemas térmico y mecánico por separado y sólo se requiere esfuerzo adicional de programación en la incorporación de los términos de acoplamiento.

Módulo tangente

En este punto analizamos en detalle las contribuciones a la matriz tangente general \mathbf{K} inducidas por las tensiones, o sea:

$$\frac{\partial \mathbf{P}^m}{\partial \mathbf{T}} = \int_{\Omega} \mathbf{B}^T \frac{\partial \boldsymbol{\sigma}}{\partial \mathbf{T}} \, dv,
\frac{\partial \mathbf{P}^m}{\partial \mathbf{U}} = \int_{\Omega} \mathbf{B}^T \frac{\partial \boldsymbol{\sigma}}{\partial \mathbf{U}} \, dv = \int_{\Omega} \mathbf{B}^T \frac{\partial \boldsymbol{\sigma}}{\partial \boldsymbol{\varepsilon}} \mathbf{B} \, dv = \mathbf{K}^m.$$

Consideremos la expresión (15) de la tensión en el instante t_{n+1} , teniendo en cuenta la regla de flujo discreta (13) y el hecho de que Tr (ε^p) = 0 (incompresibilidad plástica):

$$\boldsymbol{\sigma}_{n+1} = \mathbf{C}_{n+1} : \boldsymbol{\varepsilon}_{n+1} - 2\mu_{n+1}\boldsymbol{\varepsilon}_{n+1}^p - 3\kappa_{n+1}\hat{\beta}_{n+1}\mathbf{l},$$

cuyo diferencial es:

$$d\boldsymbol{\sigma}_{n+1} = \mathbf{C}_{n+1}^{in} : d\boldsymbol{\varepsilon}_{n+1} + \mathbf{C}_{n+1}^t dT_{n+1},$$

donde

$$\mathbf{C}_{n+1}^{in} = \frac{\partial \boldsymbol{\sigma}_{n+1}}{\partial \boldsymbol{\varepsilon}_{n+1}} = \mathbf{C}_{n+1} - 2\mu_{n+1} \frac{\partial \boldsymbol{\varepsilon}_{n+1}^{in}}{\partial \boldsymbol{\varepsilon}_{n+1}},\tag{19}$$

$$\mathbf{C}_{n+1}^{t} = \frac{\partial \boldsymbol{\sigma}_{n+1}}{\partial T_{n+1}} = \frac{d\mathbf{C}_{n+1}}{dT_{n+1}} : \boldsymbol{\varepsilon}_{n+1} - 2\frac{d\mu_{n+1}}{dT_{n+1}}\boldsymbol{\varepsilon}_{n+1}^{in} - 3\left(\frac{d\kappa_{n+1}}{dT_{n+1}}\hat{\beta}_{n+1} + \kappa_{n+1}\frac{d\hat{\beta}_{n+1}}{dT_{n+1}}\right)\mathbf{l}.$$
 (20)

El tensor \mathbf{C}^{in} se conoce como módulo tangente inelástico. Para su introducción en la formulación por MEF, debe ser llevado a la forma matricial tal como se procedió con el módulo elástico \mathbf{C} anteriormente.

ALGORITMO DE AVANCE

Un aspecto crucial del análisis mecánico del problema de colada continua reside en el transporte del metal colado. La respuesta de este material, se suponga plástica o viscoplástica, dependerá de la historia de deformación de cada una de sus partículas. Por esta razón, resulta natural una descripción Lagrangiana del problema, que requiere comúnmente que cada elemento finito atraviese el dominio completo en cada incremento de tiempo.⁴ Una opción más barata, y ciertamente menos precisa, consiste en registrar la historia de sólo una rodaja de material en estado plano de deformación.⁵ Alternativamente, hemos evaluado también la técnica ALE (Lagrangiano-Euleriano Arbitrario),⁴ que incluye un remapeo Euleriano tras cada paso Lagrangiano.

En este trabajo, proponemos una formulación Lagrangiana que, a diferencia de las implementadas previamente, no requiere la advección de la malla de elementos finitos. Para ello, consideremos la evolución de la deformación inelástica ε^{in} , ecuación (13), en una partícula genérica X identificada por su posición X en una configuración de referencia:

$$\boldsymbol{\varepsilon}^{in}(\mathbf{X}, t_{n+1}) = \boldsymbol{\varepsilon}^{p}(\mathbf{X}, t_{n}) + [\Delta \gamma \mathbf{n}]_{\mathbf{X}, t_{n+1}}.$$
(21)

Tratándose de un problema estacionario, el estado de la partícula X en el instante t_n , cuando ocupaba la posición actual de X^n , coincidirá con el estado actual de esta última partícula, o sea:

$$\boldsymbol{\varepsilon}^{in}(\mathbf{X},t_n) = \boldsymbol{\varepsilon}^{in}(\mathbf{X}^n,t_{n+1}).$$

Luego, la derivada de la expresión (21), involucrada en la expresión (19) del módulo tangente, debe incluir un término debido a la variación en el punto material X^n , donde se debe tener en cuenta, a su vez, la variación en X^{n-1} y así sucesivamente. O sea:

$$\frac{\partial \varepsilon^{in}}{\partial \varepsilon}\Big|_{\mathbf{X},t_{n+1}} = \left[\mathbf{n} \otimes \frac{\partial \Delta \gamma}{\partial \varepsilon} + \Delta \gamma \frac{\partial \mathbf{n}}{\partial \varepsilon}\right]_{\mathbf{X},t_{n+1}} + \left.\frac{\partial \varepsilon^{in}}{\partial \varepsilon}\right|_{\mathbf{X}^{n},t_{n+1}}, \\
\frac{\partial \varepsilon^{in}}{\partial \varepsilon}\Big|_{\mathbf{X}^{n},t_{n+1}} = \left[\mathbf{n} \otimes \frac{\partial \Delta \gamma}{\partial \varepsilon} + \Delta \gamma \frac{\partial \mathbf{n}}{\partial \varepsilon}\right]_{\mathbf{X}^{n},t_{n+1}} + \left.\frac{\partial \varepsilon^{in}}{\partial \varepsilon}\right|_{\mathbf{X}^{n-1},t_{n+1}}, \\
\vdots \\
\frac{\partial \varepsilon^{in}}{\partial \varepsilon}\Big|_{\mathbf{X}^{J+1},t_{n+1}} = \left[\mathbf{n} \otimes \frac{\partial \Delta \gamma}{\partial \varepsilon} + \Delta \gamma \frac{\partial \mathbf{n}}{\partial \varepsilon}\right]_{\mathbf{X}^{J+1},t_{n+1}} + \left.\frac{\partial \varepsilon^{in}}{\partial \varepsilon}\Big|_{\mathbf{X}^{J},t_{n+1}}, \\
\frac{\partial \varepsilon^{in}}{\partial \varepsilon}\Big|_{\mathbf{X}^{J},t_{n+1}} = \left[\mathbf{n} \otimes \frac{\partial \Delta \gamma}{\partial \varepsilon} + \Delta \gamma \frac{\partial \mathbf{n}}{\partial \varepsilon}\right]_{\mathbf{X}^{J},t_{n+1}}, \\
\frac{\partial \varepsilon^{in}}{\partial \varepsilon}\Big|_{\mathbf{X}^{J},t_{n+1}} = 0, \\
\vdots \\
\frac{\partial \varepsilon^{p}}{\partial \varepsilon}\Big|_{\mathbf{X}^{J-1},t_{n+1}} = 0.$$
(22)

Nótese que en las partículas X^i (i < J) cuya temperatura es mayor que la de coherencia T_c , no hay variación de las variables de estado.

Análogamente, para la deformación inelástica acumulada tenemos:

$$\alpha(\mathbf{X}, t_{n+1}) = \alpha(\mathbf{X}^n, t_{n+1}) + \sqrt{\frac{2}{3}} \Delta \gamma(\mathbf{X}, t_{n+1}).$$
(23)

Esta formulación es particularmente provechosa en su aplicación al problema que nos ocupa, donde el dominio es cilíndrico y, si despreciamos la componente infinitesimal inducida por las deformaciones, el campo de velocidades en la cáscara sólida se puede considerar constante y uniforme, dado por la velocidad nominal de colada V_c . Luego, la determinación de las trayectorias de cada partícula es inmediata, como se observa en la Figura 1. Ventajas adicionales se logran con mallas de elementos finitos rectangulares, cuyo paso en dirección axial sea constante e igual a un múltiplo de $V_c\Delta t$.

Caso de comportamiento viscoplástico. Con el parámetro de consistencia definido por el modelo de Perzyna, ecuación (10), obtenemos

$$\Delta \gamma(\mathbf{X}, t_{n+1}) = \gamma(\mathbf{X}, t_{n+1}) \Delta t = \left. \frac{g}{\eta} \right|_{\mathbf{X}, t_{n+1}} \Delta t,$$



Figura 1: Trayectoria de la partícula $X \equiv X^{n+1}$ durante la colada continua, suponiendo velocidad V_c constante y uniforme y paso de tiempo Δt constante.

cuya derivada está dada por

$$\frac{\partial \Delta \gamma}{\partial \varepsilon} = \frac{g'}{\eta} \frac{\partial f}{\partial \varepsilon} \Delta t,$$

 $\cos g' = dg/df$. En adelante, siempre que no se indique la partícula y el instante de evaluación, nos estaremos refiriendo a la partícula típica X en el instante actual t_{n+1} .

Dada la fuerza termodinámica R en función de su variable conjugada α , denotamos $R' = dR/d\alpha$ el módulo de endurecimiento isotrópico. Luego, podemos expresar la derivada de la función de fluencia f con respecto a las deformaciones como:

$$\frac{\partial f}{\partial \varepsilon} = \frac{\partial \|\mathbf{s}\|}{\partial \varepsilon} - \sqrt{\frac{2}{3}} R' \frac{\partial \alpha}{\partial \varepsilon} = \frac{\partial \|\mathbf{s}\|}{\partial \varepsilon} - \sqrt{\frac{2}{3}} R' \left(\sqrt{\frac{2}{3}} \frac{\partial \Delta \gamma}{\partial \varepsilon} + \frac{\partial \alpha}{\partial \varepsilon} \Big|_{\mathbf{X}^n} \right).$$

Siguiendo la técnica de retorno mapeado (radial en el caso de estado plano de deformación, axisimétrico o tridimensional) desarrollada por Simo et al.,⁶ definimos un estado de prueba suponiendo que el paso de t_n a t_{n+1} ha sido completamente elástico, de modo que el desviador de la tensión de prueba queda definido por:

$$\mathbf{s}^{trial} = 2\mu \left[\operatorname{dev} \left(\boldsymbol{\varepsilon} \right) - \boldsymbol{\varepsilon}^{vp}(\mathbf{X}, t_n) \right] = 2\mu \left[\operatorname{dev} \left(\boldsymbol{\varepsilon} \right) - \boldsymbol{\varepsilon}^{vp}(\mathbf{X}^n, t_{n+1}) \right]$$

con el supraíndice in cambiado por vp en alusión al carácter viscoplástico del flujo. Este estado de prueba se relaciona con el real por medio de la expresión:

$$\|\mathbf{s}\| = \|\mathbf{s}^{trial}\| - 2\mu\Delta\gamma,$$

de donde:

$$\frac{\partial \|\mathbf{s}\|}{\partial \varepsilon} = \frac{\partial \|\mathbf{s}^{trial}\|}{\partial \varepsilon} - 2\mu \frac{\partial \Delta \gamma}{\partial \varepsilon} = 2\mu \left(\mathbf{I} - \frac{\partial \varepsilon^{vp}}{\partial \varepsilon}\Big|_{\mathbf{X}^n}\right) \mathbf{n} - 2\mu \frac{\partial \Delta \gamma}{\partial \varepsilon}.$$

Teniendo en cuenta esta relación, obtenemos

$$\frac{\partial f}{\partial \boldsymbol{\varepsilon}} = 2\mu \left(\mathbf{I} - \left. \frac{\partial \boldsymbol{\varepsilon}^{vp}}{\partial \boldsymbol{\varepsilon}} \right|_{\mathbf{X}^n} \right) \mathbf{n} - 2\mu \left(1 + \frac{R'}{3\mu} \right) \frac{\partial \Delta \gamma}{\partial \boldsymbol{\varepsilon}} - \sqrt{\frac{2}{3}} R' \left. \frac{\partial \alpha}{\partial \boldsymbol{\varepsilon}} \right|_{\mathbf{X}^n},$$

y finalmente:

$$\frac{\partial \Delta \gamma}{\partial \varepsilon} = \Theta \left[\left(\mathbf{I} - \left. \frac{\partial \varepsilon^{vp}}{\partial \varepsilon} \right|_{\mathbf{X}^n} \right) \mathbf{n} - \frac{R'}{\sqrt{6}\mu} \left. \frac{\partial \alpha}{\partial \varepsilon} \right|_{\mathbf{X}^n} \right],\tag{24}$$



Figura 2: Modelo termo-mecánico del proceso de colada continua de acero. Malla de elementos finitos para el análisis mecánico.

 \cos

$$\Theta^{-1} = 1 + \frac{R'}{3\mu} + \frac{\eta}{2\mu g' \Delta t}.$$

Por su parte, la derivada de \mathbf{n} con respecto a las deformaciones está dada por:

$$\frac{\partial \mathbf{n}}{\partial \varepsilon} = \frac{2\mu}{\|\mathbf{s}^{trial}\|} \left[\mathbf{I} - \frac{1}{3} \mathbf{1} \otimes \mathbf{1} - \mathbf{n} \otimes \mathbf{n} - (\mathbf{I} - \mathbf{n} \otimes \mathbf{n}) \left. \frac{\partial \varepsilon^{vp}}{\partial \varepsilon} \right|_{\mathbf{X}^n} \right].$$
(25)

Al remplazar las expresiones (24) y (25) en la ecuación (22), la derivada del campo de deformaciones viscoplásticas con respecto a la deformación total puede expresarse como:

$$\frac{\partial \boldsymbol{\varepsilon}^{vp}}{\partial \boldsymbol{\varepsilon}} = \boldsymbol{\theta} \mathbf{n} \otimes \mathbf{n} + \omega \left(\mathbf{I} - \frac{1}{3} \mathbf{1} \otimes \mathbf{1} \right) - \left[\boldsymbol{\theta} \mathbf{n} \otimes \mathbf{n} + (\omega - 1) \mathbf{I} \right] \left. \frac{\partial \boldsymbol{\varepsilon}^{vp}}{\partial \boldsymbol{\varepsilon}} \right|_{\mathbf{X}^n} - \Theta \frac{R'}{\sqrt{6}\mu} \left. \frac{\partial \alpha}{\partial \boldsymbol{\varepsilon}} \right|_{\mathbf{X}^n} \otimes \mathbf{n}, \qquad (26)$$

 donde

$$\begin{aligned} \omega &= \frac{2\mu\Delta\gamma}{\|\mathbf{s}^{trial}\|}, \\ \theta &= \Theta - \omega. \end{aligned}$$

Con la sustitución de esta expresión en la ecuación (19), queda completamente definido el módulo viscoplástico tangente.

Caso de comportamiento plástico. El modelo viscoplástico, tal como lo hemos formulado, constituye una regularización penalizada del modelo plástico independiente de la tasa, siendo η^{-1} el parámetro de penalización. En otras palabras, podríamos interpretar el comportamiento plástico como caso límite del viscoplástico cuando η^{-1} toma valores muy grandes (o sea, $\eta \to 0$), no requiriéndose una formulación adicional.

APLICACIÓN DEL ALGORITMO DE AVANCE



Figura 3: Isolíneas de temperaturas y tensiones equivalentes en la capa externa del tocho.

Se evaluará el algoritmo de avance aplicado al problema de colada continua de un acero de 0.3% de carbono en peso. Se considera que el acero es colado a temperatura uniforme $T_{pour} = 1530^{o}C$, con velocidad constante y uniforme $V_c = 1.8 \ m/min$. Habiéndose estimado en planta el flujo de calor en el molde y en la zona de sprays,⁷ el dominio de análisis comprende sólo el tocho, cuyo diámetro es de 212 mm. Las propiedades térmicas del material corresponden a la misma referencia. Se supone que el calor latente es liberado uniformente durante el cambio de fase.

En cuanto a la respuesta mecánica, se adopta el modelo viscoplástico para aceros a alta temperatura propuesto por Kozlowski³ que ya describiéramos. Además, se desprecia la acción de la presión ferrostática y la fase líquida (o más estrictamente, el material a temperatura superior a la de coherencia) se modela como un sólido de rigidez muy baja.

Se emplean elementos cuadrangulares bilineales. La malla, como puede apreciarse en la Figura 2, no es suficientemente densa. La misma es uniforme en dirección axial, con $n_z = 21$ divisiones. Si $\Delta t = n\Delta z/V_c$ $(n = 1, 2, \dots)$, siendo Δz el paso de la malla, no es necesario el remapeo de la solución en cada paso de tiempo. En este ejemplo, adoptamos n = 1.

A la izquierda de la Figura 3 se grafica la distribución de temperaturas en el tocho en la proximidad del molde y los sprays. A la derecha, se observan las isolíneas de tensión equivalente σ_{eq} en la misma región.

La solución obtenida coincide en buen grado con los resultados de trabajos anteriores en los que se aplicaron técnicas de advección puramente Lagrangiana y ALE.⁴ En esos casos, la malla debió avanzar en un número de pasos múltiplo de n_z (típicamente, el doble o el triple) hasta recorrer el dominio completo. A su vez, en cada paso se requirió un cierto número de iteraciones para resolver el problema no lineal de tensionesdeformaciones. Dado que la malla permanece fija, el esquema propuesto consiste de un paso único. Para este problema, la solución se alcanzó en 13 iteraciones, reduciéndose el residuo a 10^{-6} veces su magnitud inicial (correspondiente al estado indeformado).

CONCLUSIONES

En la etapa actual del trabajo, el análisis comparativo del costo y la calidad de las soluciones ha alcanzado recién la profundidad y extensión necesaria para establecer conclusiones de carácter preliminar.

Este trabajo presenta dos innovaciones fundamentales con respecto a los modelos mecánicos que implementamos a lo largo de la investigación,^{4,5} a saber: i) el algoritmo de avance Lagrangiano sin advección de la malla y *ii*) el esquema monolítico de acoplamiento.

La técnica de avance Lagrangiana a malla fija permite independizar el costo computacional de la discretización espacial del problema (en dirección axial). Ello implica un ahorro formidable frente a esquemas como el Lagrangiano puro y el ALE previamente implementados. De hecho, al estudiarse un proceso de solidificación se presentan gradientes muy pronunciados en todos los campos involucrados, haciendo imprescindible el uso de mallas muy densas.

Con el esquema monolítico de acoplamiento propuesto, esperamos seguir avanzando en la búsqueda de algoritmos más eficientes en cuanto a robustez y velocidad de convergencia.

Referencias

- A. N. Brooks, T. J. R. Hughes. Streamline Upwind/Petrov-Galerkin Formulations for Convection Dominated Flows with Particular Emphasis on the Incompressible Navier-Stokes Equations. Comput. Meths. Appl. Mech. Engrg., 32, 1982.
- [2] V. Fachinotti, A. Cardona, A. Huespe. Numerical Simulation of Conduction-Advection Problems with Phase Change. En Actas del VII Congreso Latinoamer. de Transf. de Calor y Materia (LATCYM'98), volumen II, Salta, Argentina, 1998.
- [3] P. F. Kozlowski, B. G. Thomas, J. A. Azzi, H. Wang. Simple Constitutive Equations for Steel at High Temperature. *Metallurgical Transactions A*, 19A, 1991.
- [4] A. E. Huespe, A. Cardona, V. Fachinotti. Thermomechanical Model of a Continuous Casting Process. En prensa, Comput. Meths. Appl. Mech. Engrg., 1999.
- [5] A. Cardona, A. Huespe, V. Fachinotti. Modelado Termo-Mecánico del Proceso de Colada Continua de Aceros. En Anales del XVIII Congresso Ibero Latino-Amer. de Mét. Comp. para Eng. (XVIII CILAM-CE), volumen I, Brasília, Brasil, 1997.
- [6] J. C. Simo, T. J. R. Hughes. Computational Inelasticity. Springer-Verlag, New York, 1998.
- [7] S. Rugonyi, M. Goldschmit, E. Dvorkin. Análisis Numérico Experimental de la CC3 de SIDERCA. Informe de Avance CINI I-953/96, Junio 1996.