

## UN MODELO TERMOMECAÁNICO PARA PROBLEMAS DE SOLIDIFICACIÓN DE METALES

Diego Celentano, Sergio Oller y Eugenio Oñate

*Centro Internacional de Métodos Numéricos en Ingeniería (CIMNE)*  
*Universitat Politècnica de Catalunya*  
*Gran Capità s/n, Mòdul C1, 08034 Barcelona, España*

### RESUMEN

Se presenta en este trabajo un modelo termomecánico acoplado para simular problemas de solidificación de metales. El modelo está formulado desde un punto de vista fenomenológico a través de la teoría de la termoelastoplasticidad isótropa. Se tienen en cuenta los efectos de cambio de fase generalizado que experimenta el material durante su evolución de estado líquido a sólido. Con esta finalidad, se definen una función de cambio de fase, ecuaciones de evolución de las variables plásticas y una ley constitutiva dependiente de la temperatura. Se consideran, además, los términos de acoplamiento tanto en el dominio del continuo como en su contorno.

Se estudia el comportamiento de este modelo en el análisis de un ensayo experimental de solidificación de una probeta cilíndrica de aluminio. En este problema se tienen en cuenta efectos de cambio de fase, propiedades del material dependientes de la temperatura y fenómenos de contacto termomecánico entre la pieza y el molde que la contiene. Por último, se comparan los resultados numéricos con las medidas obtenidas en laboratorio.

### 1. INTRODUCCIÓN

La descripción completa del comportamiento termomecánico de cuerpos con propiedades térmicas y mecánicas variables, que además cambian su temperatura durante un determinado proceso, es de gran importancia práctica en muchas situaciones que se presentan en el campo de la ingeniería. Si bien diversos investigadores han intentado realizar un estudio analítico de esta clase de problemas, se ha reconocido ampliamente que el uso de métodos numéricos es imprescindible para considerar problemas reales complejos [6-11]. Para tal fin, durante las últimas décadas se han realizado análisis numéricos utilizando formulaciones termomecánicas que incluyen, a su vez, variables internas gobernadas por ecuaciones de evolución [1-3]. Algunos de estos modelos se han usado para simular procesos de solidificación. Sin embargo, el problema tiene muchos aspectos complejos que son difíciles de modelar [6-11].

En este trabajo se presenta un modelo termomecánico acoplado para simular el problema de solidificación en procesos de fundición. El modelo, basado en la teoría de la termoplasticidad isótropa y formulado desde un punto de vista macroscópico, incluye efectos de cambio de fase generalizado y considera los diferentes comportamientos termomecánicos del material que solidifica durante su evolución de la fase líquida a la sólida. Se definen, entonces, una función de cambio de fase, ecuaciones de evolución plástica y una ley constitutiva dependiente de la temperatura. No se desprecian los términos de acoplamiento en las diferentes ecuaciones y, además, se consideran condiciones de contorno térmicas y mecánicas variables.

La forma débil y la formulación de elementos finitos de este modelo termomecánico acoplado se detallan en [18].

Por último, se analiza un ejemplo de aplicación del modelo termomecánico propuesto en este trabajo, es decir, se presenta la validación de dicho modelo termomecánico en la simulación de un problema de fundición, que incluye efectos de cambio de fase, propiedades dependientes de

la temperatura y contacto termomecánico, contrastando los resultados numéricos con algunas mediciones realizadas en laboratorio.

## 2. FORMULACIÓN TERMOMECAÍNICA

### a) Definiciones básicas

Sean  $\Omega_{(i)} \subset \mathbb{R}^{n_{dim}}$  ( $1 \leq n_{dim} \leq 3$  y  $i = 1, \dots, n_{body}$ ) las configuraciones de referencia (inicial) de diversos  $n_{body}$  cuerpos continuos  $\mathcal{B}_{(i)}$  (que pueden interactuar termomecánicamente entre sí) con coordenadas materiales designadas como  $\mathbf{X} \in \tilde{\Omega}_{(i)}$  (todas ellas medidas con respecto al mismo sistema de ejes coordenados),  $\Gamma_{(i)} = \partial\Omega_{(i)}$  sus contornos respectivamente, y  $\Upsilon \subset \mathbb{R}^+$  el intervalo de tiempo de análisis ( $t \in \Upsilon$ ). También,  $\varphi_{(i)}(\cdot, t) : \mathcal{B}_{(i)} \rightarrow \mathbb{R}^{n_{dim}}$  indica, respectivamente, las configuraciones de dichos cuerpos en el tiempo  $t$  y, como es convencional,  $\tilde{\Omega}_{(i)} = \Omega_{(i)} \cup \Gamma_{(i)}$ . En el contexto de desplazamientos/deformaciones supuesto en este trabajo, las configuraciones  $\varphi_{(i)}$  para diferentes tiempos coinciden, respectivamente, con las de referencia. Por simplicidad en la notación, el subíndice  $(i)$  será eliminado de aquí en adelante.

En los problemas de cambio de fase, el dominio  $\Omega$  se descompone en  $n_{ph}$  dominios ( $\Omega = \cup \Omega_{ph}$  con  $ph = 1, \dots, n_{ph}$ ) acotados por  $n_p$  contornos móviles de cambio de fase  $\Gamma_{pc}^p$  ( $p = 1, \dots, n_p$ ), tal que  $n_{ph}$  es el número de fase o porciones de material macroscópicamente homogéneo [18]. Los problemas clásicos de cambio de fase isotérmico y no isotérmico se muestran esquemáticamente en la Figura 1, donde los subíndices  $s$ ,  $m$  y  $l$  designan fases sólida, pastosa y líquida, respectivamente. Una vez más, con el fin de simplificar la notación, los índices  $ph$  y  $p$  serán suprimidos en las ecuaciones que siguen.

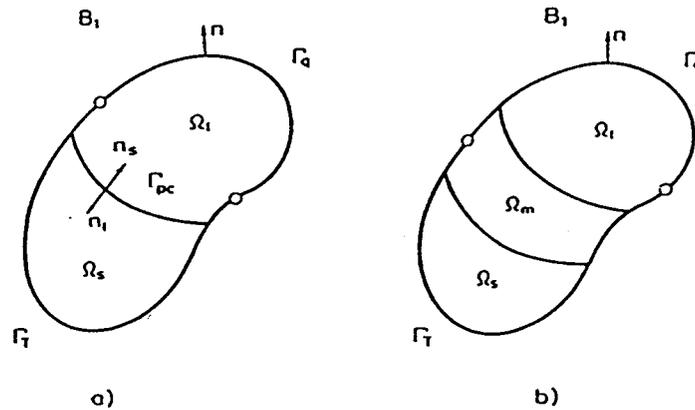


Figura 1. Descripción geométrica de un conductor de calor  $\mathcal{B}_{(1)}$  para problemas de cambio de fase: a) caso isotérmico. b) caso no isotérmico.

Un proceso termomecánico considerando el fenómeno de cambio de fase pueden ser descrito por la siguiente forma local de las ecuaciones de campo:

- condición de equilibrio,

$$\nabla \cdot \sigma + \rho_o B_F = 0 \quad \text{in } \Omega \times \Upsilon, \quad (2.1)$$

- Primera Ley de la Termodinámica o balance de la energía,

$$\rho_o \dot{\omega} = -\nabla \cdot \mathbf{q} + \rho_o \tau + \sigma : \dot{\epsilon} \quad \text{in } \Omega \times \Upsilon, \quad (2.2)$$

- Segunda Ley de la Termodinámica, expresada por la desigualdad de Clausius-Duhem,

$$\rho_o \gamma = \rho_o \dot{\eta} - \rho_o \frac{\tau}{T} + \nabla \cdot \left[ \frac{\mathbf{q}}{T} \right] \geq 0 \quad \text{in } \Omega \times \Upsilon, \quad (2.3)$$

junto con condiciones de contorno adecuadas,

$$\mathbf{u} = \bar{\mathbf{u}} \quad \text{in } \Gamma_u \times \Upsilon, \quad (2.4)$$

$$\boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{n} = \bar{\mathbf{t}} + \mathbf{t}^* \quad \text{in } \Gamma_\sigma \times \Upsilon, \quad (2.5)$$

$$T = \bar{T} \quad \text{in } \Gamma_T \times \Upsilon, \quad (2.6)$$

$$\mathbf{q} \cdot \mathbf{n} = -\bar{q} - q^* \quad \text{in } \Gamma_q \times \Upsilon, \quad (2.7)$$

condiciones iniciales,

$$\mathbf{u}(\mathbf{X}, t)|_{t=0} = \mathbf{u}_o(\mathbf{X}) = \mathbf{0} \quad \text{in } \Omega, \quad (2.8)$$

$$T(\mathbf{X}, t)|_{t=0} = T_o(\mathbf{X}) \quad \text{in } \Omega, \quad (2.9)$$

y relaciones constitutivas apropiadas para  $\omega$ ,  $\sigma$ ,  $\eta$  y  $\mathbf{q}$  (todas ellas definidas en  $\Omega \times \Upsilon$ ).

Estas ecuaciones describen un problema de valores iniciales y de contorno correspondiente a un problema termomecánico acoplado cuasi-estático;  $\nabla = \partial/\partial\mathbf{X}$  es el operador gradiente,  $\boldsymbol{\sigma} : \bar{\Omega} \times \Upsilon \rightarrow \mathbb{R}^{n_{dim}} \times \mathbb{R}^{n_{dim}}$  es el tensor de tensiones de Cauchy,  $\rho_o : \Omega \rightarrow \mathbb{R}^+$  es la densidad en la configuración de referencia y  $B_F : \Omega \times \Upsilon \rightarrow \mathbb{R}^{n_{dim}}$  es la fuerza de volumen. Además,  $\omega : \Omega \times \Upsilon \rightarrow \mathbb{R}$  es la energía interna específica,  $\mathbf{q} : \bar{\Omega} \times \Upsilon \rightarrow \mathbb{R}^{n_{dim}}$  es el vector de flujo de calor,  $\tau : \Omega \times \Upsilon \rightarrow \mathbb{R}$  es la fuente de calor específica,  $\epsilon : \Omega \times \Upsilon \rightarrow \mathbb{R}^{n_{dim}} \times \mathbb{R}^{n_{dim}}$  es el tensor de deformaciones infinitesimal y  $\mathbf{u} : \bar{\Omega} \times \Upsilon \rightarrow \mathbb{R}^{n_{dim}}$  es el vector de campo de desplazamientos. El punto superpuesto implica derivada temporal y se usa la notación convencional para multiplicación de tensores [4]. En la ecuación (2.3),  $\gamma : \Omega \times \Upsilon \rightarrow \mathbb{R}$  es la tasa de producción de entropía interna específica y  $\eta : \Omega \times \Upsilon \rightarrow \mathbb{R}$  es la entropía específica.

En las ecuaciones (2.4) y (2.5) se supone que el campo de desplazamientos  $\mathbf{u}(\mathbf{X}, t)$  y el tensor de tensiones  $\boldsymbol{\sigma}(\mathbf{X}, t)$  están prescritos en las partes del contorno  $\Gamma_u \subset \mathbb{R}^{n_{dim}-1}$  y  $\Gamma_\sigma \subset \mathbb{R}^{n_{dim}-1}$  respectivamente, donde  $\mathbf{n} : \partial\Omega \rightarrow \mathbb{R}^{n_{dim}-1}$  es la normal saliente unitaria al contorno,  $\bar{\mathbf{u}} : \Gamma_u \times \Upsilon \rightarrow \mathbb{R}^{n_{dim}}$  es el campo de desplazamientos prescritos,  $\bar{\mathbf{t}} : \Gamma_\sigma \times \Upsilon \rightarrow \mathbb{R}^{n_{dim}}$  es el vector de tracción prescrito y  $\mathbf{t}^* : \Gamma_\sigma \times \Upsilon \rightarrow \mathbb{R}^{n_{dim}}$  es el vector de tracción de contacto debido al hecho que los  $B_{(i)}$  cuerpos pueden interactuar ente ellos [18,19]. Además, se suponen las condiciones:  $\bar{\Gamma}_u \cup \bar{\Gamma}_\sigma = \partial\bar{\Omega}$  y  $\Gamma_u \cap \Gamma_\sigma = \emptyset$  (ver Figura 2).

De igual forma, en las ecuaciones (2.6) y (2.7), el campo de temperaturas absolutas  $T : \bar{\Omega} \times \Upsilon \rightarrow \mathbb{R}^+$  y el vector de flujo de calor  $\mathbf{q}(\mathbf{X}, t)$  están prescritos en las partes de contorno  $\Gamma_T \subset \mathbb{R}^{n_{dim}-1}$  y  $\Gamma_q \subset \mathbb{R}^{n_{dim}-1}$  respectivamente, donde  $\bar{T} : \Gamma_T \times \Upsilon \rightarrow \mathbb{R}^+$  es el campo de temperaturas prescritas,  $\bar{q} : \Gamma_q \times \Upsilon \rightarrow \mathbb{R}$  es el flujo de calor normal prescrito y  $q^* : \Gamma_q \times \Upsilon \rightarrow \mathbb{R}$  es el flujo de calor normal prescrito debido al fenómeno de convección-radiación [4,5,18,19]. Una vez más, se consideran las siguientes condiciones (ver Figura 2)  $\bar{\Gamma}_T \cup \bar{\Gamma}_q = \partial\bar{\Omega}$  y  $\Gamma_T \cap \Gamma_q = \emptyset$ .

#### b) Relaciones constitutivas básicas

Con la ayuda de la desigualdad de Clausius-Duhem (2.3) y la definición de la energía libre específica de Helmholtz  $\psi = \psi(\epsilon, \alpha_k, T)$  [1,5], es posible establecer las relaciones constitutivas para  $\omega$ ,  $\sigma$  y  $\eta$ , donde  $\alpha_k : \Omega \times \Upsilon \rightarrow \mathbb{R}^{n_{int}}$  representa el conjunto de  $n_{int}$  ( $k = 1, \dots, n_{int}$ ;

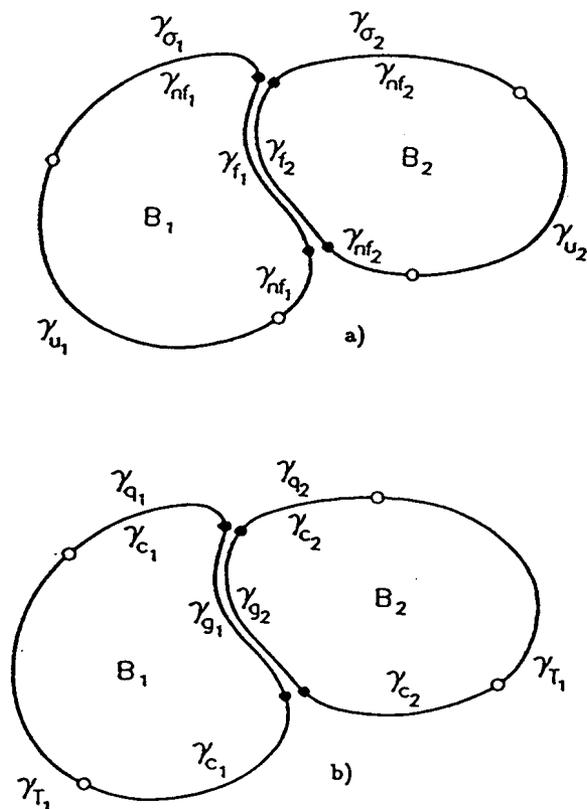


Figura 2. Descripción geométrica de dos cuerpos  $B_{(1)}$  y  $B_{(2)}$  que pueden interactuar termomecánicamente entre sí: a) condiciones de contorno mecánicas. b) condiciones de contorno térmicas.

$n_{int} \geq 1$ ) variables internas fenomenológicas regidas por ecuaciones de evolución con valores iniciales nulos [1,3]. Es importante destacar que  $\epsilon(X, t)$ ,  $\alpha_k(X, t)$  y  $T(X, t)$  han sido consideradas como las variables de estado independientes que determinan  $\psi$  [18,19].

El uso del método de Coleman [3] (teniendo en cuenta que  $\epsilon$  y  $T$  pueden ser especificadas arbitrariamente para un estado termodinámico dado), conduce a las siguientes relaciones:

$$\omega = \psi - \frac{\partial \psi}{\partial T} T, \quad (2.10)$$

$$\sigma = \hat{\sigma}(\epsilon, \alpha_k, T) = \rho_0 \frac{\partial \psi}{\partial \epsilon}, \quad (2.11)$$

$$\eta = \hat{\eta}(\epsilon, \alpha_k, T) = -\frac{\partial \psi}{\partial T}. \quad (2.12)$$

A la ecuación (2.11) se la conoce como la relación tensión-deformación isotérmica [1-3]. Por último, se adopta la conocida Ley de Fourier para  $q$  [4,5]:

$$q = -k \cdot \nabla T, \quad (2.13)$$

donde  $\mathbf{k}$  es el tensor de conductividad [4,5].

### c) Relaciones constitutivas derivadas

Otras relaciones constitutivas relacionadas con el comportamiento termomecánico del cuerpo  $B$  son [18,19]:

$$\mathbf{C} = \frac{\partial \sigma}{\partial \epsilon} = \rho_o \frac{\partial^2 \psi}{\partial \epsilon \otimes \partial \epsilon}, \quad (2.14)$$

$$\gamma_k = -\frac{\partial \sigma}{\partial \alpha_k} = -\rho_o \frac{\partial^2 \psi}{\partial \epsilon \otimes \partial \alpha_k}, \quad (2.15)$$

$$\beta = -\frac{\partial \sigma}{\partial T} = -\rho_o \frac{\partial^2 \psi}{\partial \epsilon \partial T}, \quad (2.16)$$

donde  $\mathbf{C}$  es el tensor constitutivo elástico tangente (isotérmico),  $\gamma_k$  son las variables plásticas constitutivas tangentes y  $\beta$  es el tensor tangente conjugado de la dilatación térmica [13-16,18,19]. El símbolo  $\otimes$  indica la multiplicación apropiada de acuerdo con la naturaleza de cada variable interna [18,19].

En problemas de cambio de fase, se adopta la siguiente definición general [13-19]:

$$c = -\frac{\partial^2 \psi}{\partial T^2} - L \frac{\partial f_{pc}(T)}{\partial T}, \quad (2.17)$$

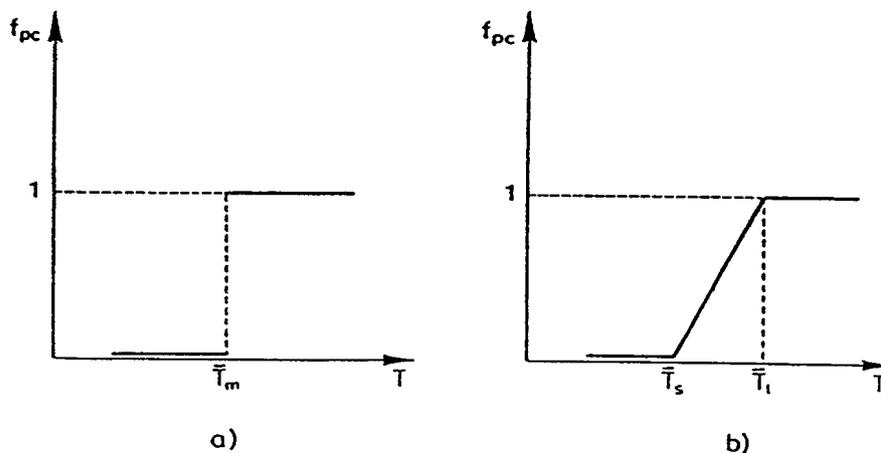


Figura 3. Función de cambio de fase: a) caso isotérmico. b) caso no isotérmico.

donde  $c : \Omega \times \Upsilon \rightarrow \mathbb{R}^+$  es el calor específico,  $L$  es el calor latente específico (liberado en un problemas de enfriamiento y absorbido en uno de calentamiento) y  $f_{pc}$  es la "función de cambio de fase" [13-19]. En un problema de cambio de fase isotérmico  $f_{pc} = H(T - \bar{T}_m)$ , siendo  $H$  la función de Heaviside y  $\bar{T}_m$  la temperatura de fusión (ver Figura 3). Por otro lado, cuando el cambio de fase ocurre en un rango de temperaturas ( $\bar{T}_l - \bar{T}_s$ ),  $f_{pc} = f$  con:

$$f(T) = \begin{cases} 0 & ; \forall T \leq T_s \\ 0 < g(T) \leq 1 & ; T_s < \forall T \leq T_l \\ 1 & ; \forall T > T_l. \end{cases} \quad (2.18)$$

donde  $\bar{T}_l$  y  $\bar{T}_s$  son las temperaturas liquidus y solidus, respectivamente [18,19]. Desde un punto de vista fenomenológico, la opción más simple para la función  $g$  es la lineal (ver Figura 3):  $g(T) = (T - \bar{T}_s)/(\bar{T}_l - \bar{T}_s) \quad \forall \bar{T}_s < T \leq \bar{T}_l$ .

En las Referencias [17 - 19] se detalla una generalización de la ecuación (2.17) cuando tienen lugar dos o más cambios de fase en el mismo cuerpo.

### 3. MODELO TERMOELASTOPLÁSTICO

#### a) Definiciones básicas

Dentro del contexto de la plasticidad no dependiente del tiempo [1,2], el comportamiento termoplástico de un cuerpo está regido por una función de estado, denominada función de cedencia o fluencia convexa [1,2],  $F(\mathbf{g}_k) : \mathbb{R}^{n_{dim}} \rightarrow \mathbb{R}$  ( $\mathbf{g}_k = -\partial\psi/\partial\alpha_k$ ), tal que no se producen evoluciones de las variables plásticas cuando  $F < 0$ . De acuerdo con las Referencias [18,19], se tiene un modelo termoplástico particular cuando se adopta que  $F = \hat{F}(\boldsymbol{\sigma}, C^p, T)$ , donde  $C^p : \Omega \times \Upsilon \rightarrow \mathbb{R}$  es la función de endurecimiento plástico [1,2]. Para este caso, el dominio termoeástico admisible  $\mathbb{IE}^{te}$  se define como [8,18,19]:

$$\mathbb{IE}^{te} = \left\{ (\boldsymbol{\sigma}, C^p, T) \in (\mathbb{R}^{n_{dim}} \times \mathbb{R}^{n_{dim}}) \times \mathbb{R} \times \mathbb{R}^+ \mid F(\boldsymbol{\sigma}, C^p, T) < 0 \right\}, \quad (3.1.a)$$

mientras que el dominio termoplástico es:

$$\mathbb{IE}^{tp} = \left\{ (\boldsymbol{\sigma}, C^p, T) \in (\mathbb{R}^{n_{dim}} \times \mathbb{R}^{n_{dim}}) \times \mathbb{R} \times \mathbb{R}^+ \mid F(\boldsymbol{\sigma}, C^p, T) = 0 \right\} = \partial\mathbb{IE}^{te}. \quad (3.1.b)$$

Además, el Principio de Máxima Disipación Plástica [1,2] conduce a un modelo constitutivo asociado caracterizado por las variables plásticas ( $\alpha_1 = e^p, \alpha_2 = C^p, \alpha_3 = \eta^p$ ) con las siguientes ecuaciones de evolución [18,19]:

$$\dot{e}^p = \frac{\partial F}{\partial \boldsymbol{\sigma}} \dot{\lambda}, \quad (3.2)$$

$$\dot{C}^p = H_{Cr} \dot{\lambda} \quad (3.3)$$

$$\dot{\eta}^p = \frac{1}{\rho_o} \frac{\partial F}{\partial T} \dot{\lambda}, \quad (3.4)$$

junto con las condiciones de carga-descarga de Kuhn-Tucker [1,2]  $\dot{\lambda} \geq 0$ ,  $F \leq 0$ ,  $\dot{\lambda} F = 0$  y la condición de consistencia [1,2]  $\dot{\lambda} \hat{F} = 0$ , donde  $e^p : \Omega \times \Upsilon \rightarrow \mathbb{R}^{n_{dim}} \times \mathbb{R}^{n_{dim}}$  es el tensor de deformación plástica,  $\eta^p : \Omega \times \Upsilon \rightarrow \mathbb{R}$  es la entropía plástica específica y  $H_{Cr}(T) : \Omega \times \Upsilon \rightarrow \mathbb{R}$  es el módulo de endurecimiento plástico dado por [18,19]:

$$H_{Cr} = h_{Cr}(T) \boldsymbol{\sigma} : \boldsymbol{R}, \quad (3.5)$$

donde  $h_{Cr}(T) : \Omega \times \Upsilon \rightarrow \mathbb{R}$  es el coeficiente de endurecimiento plástico y  $\boldsymbol{R} = \partial F / \partial \boldsymbol{\sigma}$  es el flujo potencial. Como puede verse en estas ecuaciones,  $\dot{C}^p$  está definido en función de  $\dot{e}^p$  [13-16,18,19].

## b) Función de energía libre propuesta

Restringiendo la formulación del modelo al comportamiento termoelastoplástico isótropo, la energía libre  $\psi$  se formula como [5-7,13-16,18,19]:

$$\psi = \hat{\psi}_{te}(\epsilon - \epsilon^p, T) + \hat{\psi}_p(C^p, \eta^p, T) + \hat{\psi}_{pc}(T), \quad (3.6)$$

donde  $\hat{\psi}_{te}$ ,  $\hat{\psi}_{tp}$  y  $\hat{\psi}_{pc}$  son las partes termoelástica, termoplástica y de cambio de fase, respectivamente, de la función  $\psi$ . Debe notarse que la ecuación (3.6) constituye una forma parcialmente desacoplada de definir  $\psi$  [1-5]. La parte termoelástica  $\hat{\psi}_{te}$  se escribe como:

$$\begin{aligned} \hat{\psi}_{te} = \hat{\psi}_{te}(\epsilon - \epsilon^p, T) = & \frac{1}{2\rho_0}(\epsilon - \epsilon^p) : \mathcal{C}(T) : (\epsilon - \epsilon^p) - \frac{1}{\rho_0} \mathcal{C}(T) : [\alpha_{th}^s(T, T_{ref}) (T - T_{ref}) - \\ & - \alpha_{th}^s(T_0, T_{ref}) (T_0 - T_{ref})] : (\epsilon - \epsilon^p) + c^s(T, T_{ref}) (T - T_{ref}) - c^s(T_0, T_{ref}) (T_0 - T_{ref}) + \\ & + c^s(T, T_{ref}) T \ln \frac{T}{T_{ref}} + c^s(T_0, T_{ref}) T_0 \ln \frac{T_0}{T_{ref}} + \psi_0 - \eta_0 (T - T_0) + \frac{1}{\rho_0} \sigma_0 : (\epsilon - \epsilon^p), \end{aligned} \quad (3.7)$$

la parte termoplástica es:

$$\hat{\psi}_{tp} = \hat{\psi}_{tp}(C^p, \eta^p, T) = -\frac{C^p}{\rho_0} - T \eta^p, \quad (3.8)$$

y la parte de cambio de fase es:

$$\hat{\psi}_{pc} = \hat{\psi}_{pc}(T) = -\int_{T_{ref}}^T A_{pc}(\theta) d\theta. \quad (3.9)$$

En estas ecuaciones,  $\alpha_{th}^s$  es el tensor de dilatación térmica secante,  $T_{ref}$  es una temperatura de referencia, el subíndice  $o$  indica el estado inicial de las diferentes variables y el superíndice  $s$  se refiere a las propiedades termomecánicas secantes [18,19]. Además,  $A_{pc}$  se define como [18,19]:

$$A_{pc}(T) = \int_{T_{ref}}^T \frac{L}{\theta} \frac{\partial f_{pc}(\theta)}{\partial \theta} d\theta, \quad (3.10)$$

donde  $\theta$  es una variable muda. La parte termoelástica  $\hat{\psi}_{te}$  corresponde a una generalización de la definición convencional de la energía libre dada en el contexto de la termoelasticidad [4,5]. Por otro lado, la parte termoplástica tiene en cuenta la irreversibilidad del proceso termomecánico [3]. Por último, la parte de cambio de fase incluye los efectos de cambio de generalizado a través de la función de cambio de fase  $f_{pc}$  [18,19].

Esta definición de  $\psi$  constituye un punto crucial del modelo, ya que a partir de la misma es posible derivar las diferentes relaciones constitutivas presentadas anteriormente [18,19].

## c) Tensor constitutivo propuesto

Durante el proceso de solidificación, el material en estado líquido se transforma al estado sólido. Esto implica que se produce un importante cambio en sus propiedades termomecánicas. Por lo tanto, es necesario tener en cuenta este hecho en la definición del tensor constitutivo que, para este caso, se puede escribir como [13-16,18,19]:

$$\mathcal{C} = \mathcal{C}_{vol} + (1 - f_{pc}) \mathcal{C}_{dev}, \quad (3.11)$$

donde  $\mathcal{C}_{vol}$  y  $\mathcal{C}_{dev}$  son las partes volumétricas y desviadoras de  $\mathcal{C}$ , respectivamente [4,5]. Ahora,  $f_{pc}$  indica la función de cambio de fase asociada con un cambio de fase líquido-sólido [18,19]. En esta situación particular,  $f_{pc}$  y  $1 - f_{pc}$  representan las fracciones de volumen líquida y sólida, respectivamente.

Con esta definición de  $\mathcal{C}$ , es importante notar que es posible representar tanto la ley constitutiva convencional de un líquido en reposo ( $\sigma' = \mathbf{0}$  -siendo  $\sigma'$  el tensor de tensiones desviador-, es decir,  $\sigma$  es igual al tensor de tensiones hidrostático) como la correspondiente a un material en estado sólido [4,5].

## d) Función de fluencia

En este trabajo se adopta la conocida función de fluencia de Von Mises <sup>[1,2]</sup>:

$$F(\sigma, C^p, T) = \sqrt{3J_2} - C, \quad (3.12)$$

donde  $J_2 = \frac{1}{2} \sigma' : \sigma'$  es el segundo invariante del tensor de tensiones desviador  $\sigma'$  y  $C$  es la función de endurecimiento total definida por <sup>[18,19]</sup>:

$$C(C^p, T) = C^{th}(T) + (1 - f_{pc}) C^p, \quad (3.13)$$

donde  $C^{th}(T)$  es la función de endurecimiento térmico <sup>[18,19]</sup>.

## 4. EJEMPLO NUMÉRICO

Se estudia el ensayo experimental realizado por Nishida *et al.* <sup>[12]</sup>. El experimento consistió en verter aluminio comercial puro dentro de un molde instrumentado de acero. El análisis comienza cuando el molde se encuentra completamente lleno con aluminio en estado líquido, suponiendo que las temperaturas iniciales son de 670 °C para la pieza y 200 °C para el molde. Se ubicaron termocuplas y barras de cuarzo en el molde y en la cavidad del mismo (ver Figura 4.a) con el fin de medir la evolución de las temperaturas y de los desplazamientos radiales, respectivamente. La geometría del problema y la posición de las termocuplas se muestra en la Figura 4.b.

Todas las propiedades termomecánicas de ambos materiales se encuentran en las Referencias [18, 19]. Las propiedades térmicas y mecánicas del aluminio son dependientes de la temperatura. Debe notarse que para esta clase de aluminio, sólo se puede producir un cambio de fase isotérmico entre las fases líquida y sólida. Se supone que el acero del molde tiene propiedades térmicas y mecánicas constantes. El coeficiente de convección-radiación en la interfaz pieza-molde depende de la abertura normal  $g_n$  que se produce en la misma a medida que avanza el enfriamiento. También debe notarse que se han supuesto condiciones de impenetrabilidad en dicha interfaz, ya que la rigidez normal de la misma tiende a infinito.

Para el análisis numérico, se escoge en primera instancia un rodaja ubicada en la mitad de la altura de la pieza. La malla de elementos finitos correspondiente puede verse en la Figura 5.b. La elección de esta malla simple recae en la hipótesis que todas las variables del problema dependen únicamente de la coordenada radial y del tiempo. La misma está compuesta de 42 elementos isoparamétricos de cuatro nodos. El paso usado en el análisis numérico es de 5 s.

La evolución de la temperatura para puntos diferentes de la malla se dibujan en las Figuras 6 a 9. Los efectos del cambio de fase en la pieza se notan claramente. Además, es posible apreciar el muy buen ajuste entre los resultados numéricos y las medidas experimentales. También se muestra en estas Figuras otro resultado numérico correspondiente a la Referencia [11].

La Figura 10 muestra la evolución del desplazamiento radial en la superficie externa de la pieza mientras que en la Figura 11 se encuentra la evolución del desplazamiento radial para un punto situado en la superficie interna del molde. El cambio progresivo del contacto entre ambos cuerpos, responsable de la fuerte variación en el coeficiente de convección-radiación, se aprecia con claridad en la evolución de la abertura normal mostrada en la Figura 12.

También se analiza el problema por medio de la malla tridimensional mostrada en la Figura 5.c y, además, usando la malla bidimensional completa de la Figura 5.a. Los respectivos resultados se encuentran en las Figuras mencionadas anteriormente.

## 5. CONCLUSIONES

Se ha presentado en este trabajo un modelo termomecánico para problemas de solidificación de metales. El modelo, basado en los Principios de la Termodinámica, tiene en cuenta los diferentes estados del material que solidifica introduciendo: una función de cambio de fase, determinadas variables internas con sus respectivas ecuaciones de evolución y una ley constitutiva dependiente de la temperatura. Además, no se desprecia el acoplamiento existente en las ecuaciones que gobiernan el problema, tanto en el dominio como en los contornos.

El modelo ha sido implementado en un programa general de elementos finitos [20]. Por último, el ejemplo numérico analizado muestra la robustez del modelo.

## AGRADECIMIENTOS

Se agradece el apoyo económico dado por el proyecto BRITE/EURAM nº BE-4596 con contrato nº BREU-0443.

## REFERENCIAS

- [1]- Lubliner J. -*On the Thermodynamics Foundations of Non-linear Solid Mechanics* - Int. J. Non-linear Mechanics 7, 237-254 (1972).
- [2]- Lubliner J. -*Plasticity Theory* - Macmillan Publishing (1990).
- [3]- Coleman B. and Gurtin M. -*Thermodynamics with Internal State Variables* - The Journal of Chemical Physics, Volume 47, Number 2, 15 July 1967.
- [4]- Malvern L. -*Introduction to the Mechanics of a Continuous Medium* - 1969, Prentice-Hall, Inc..
- [5]- Ziegler H. -*An Introduction to Thermomechanics* - North-Holland Publishing Company, 1983.
- [6]- Služalec A. -*An Analysis of Thermal Effects of Coupled Thermo-Plasticity in Metal Forming Processes* - Communications in Applied Numerical Methods, Vol. 4, 675-685 (1988).
- [7]- Armero F. and Simo J. -*Product Formula Algorithms for Nonlinear Coupled Thermoplasticity: Formulation and Nonlinear Stability Analysis* - SUDAM Report No. 92-4, March 1992, Stanford University.
- [8]- Wriggers P., Miehe C., Kleiber M. and Simo J. -*On the Coupled Thermo-mechanical Treatment of Necking Problems via Finite-Element-Methods* - Proceedings of Complas II, pp. 527-542. R. Owen, E. Hinton and E. Oñate (Eds.). Pineridge Press/CIMNE, 1989.
- [9]- Kleiber M. -*Computational Coupled Non-Associative Thermo-Plasticity* - Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering 90 (1991), 943-967, North-Holland.
- [10]- Argyris J., Vaz L. and Willam K. -*Integrated Finite-Element Analysis of Coupled Thermo-viscoplastic Problems* - Journal of Thermal Stresses, 4:121-153, 1981.
- [11]- Smelser R. and Richmond O. -*Constitutive Model Effects on Stresses and Deformations in a Solidifying Circular Cylinder* - Modeling of Casting and Welding Processes IV, 1988.
- [12]- Nishida Y., Droste W. and Engler S. -*The Air-Gap Formation Process at the Casting Mold Interface and the Heat Transfer Mechanism through the Gap* - Metallurgical Transactions B, 17B (1986) 833-844.
- [13]- Celentano D., Oller S. and Oñate E. -*A Constitutive Thermomechanical Model for Solidification of Metals* - Journées Numériques de Besançon: Les problèmes de changement de phase, pp. 19-30 (1991), held at Arc et Senans, France, 23-24 September, 1991.

- [14]- Celentano D., Oller S. and Oñate E. - *A Plastic Constitutive Model to Simulate the Solidification in Casting Problems* - Proceedings of Complas III, pp. 1089-1102. R. Owen, E. Oñate and E. Hinton (Eds.), Pineridge Press/CIMNE, Swansea, held at Barcelona, Spain, 6-10 April, 1992.
- [15]- Celentano D., Oller S., Oñate E. and Dardati P. - *Thermomechanical Numerical Analysis of an Experimental Test During Solidification* - Proceedings of the "Eurotherm Seminar No. 30: Heat Transfer in Phase-Change Processes", pp. 163-166, held at Orsay (France), 22-23 October, 1992.
- [16]- Celentano D., Oller S. and Oñate E. - *A Finite Element Model for Thermomechanical Analysis in Casting Problems* - Proceedings of EUROMAT 93, the 3rd European Conference on Advanced Materials and Processes, held at Paris (France), 8-10 June, 1993.
- [17]- Celentano D., Oñate E. and Oller S. - *A Temperature-Based Formulation for Finite Element Analysis of Generalized Phase-Change Problems* - Submitted to Int. Jour. of Num. Meth. in Eng., December 1992 and accepted for publication in February 1994.
- [18]- Celentano D. - *A Thermomechanical Model for Solidification Problems in Metals (in Spanish)* - Ph.D. Thesis, Universitat Politècnica de Catalunya, Barcelona, Spain, May 1994.
- [19]- Celentano D., Oller S. and Oñate E. - *A Coupled Thermomechanical Model for the Solidification of Casted Metals* - Submitted to Int. Jour. of Solids & Structures, June 1994.
- [20]- Celentano D. - *VULCAN, Thermal and Coupled Thermomechanical Finite Element Analyses for Solidification Problems* - Users' Manual, Version 2.0 (September 1993). Submitted to Int. Jour. of Solids & Structures, June 1994.

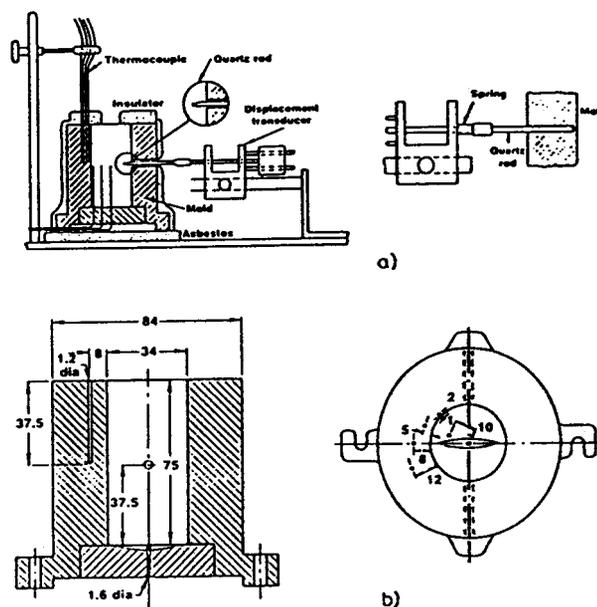


Figura 4. Test de solidificaci3n: esquema del experimento de Nishida et al.<sup>12</sup> y b) geometría y ubicaci3n de las termocuplas.

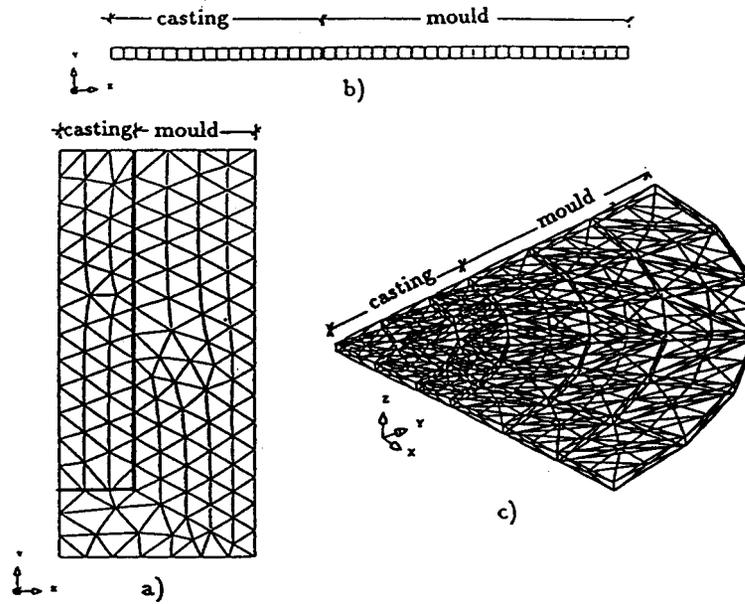


Figura 5. Test de solidificación: malla de elementos finitos.

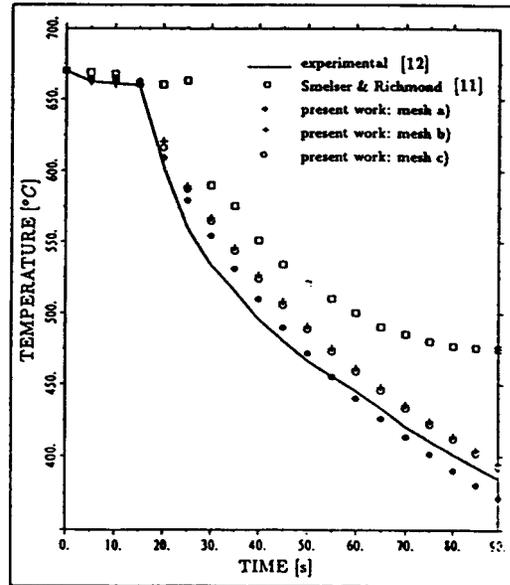


Figura 6. Test de solidificación: evolución de la temperatura en el centro de la pieza.

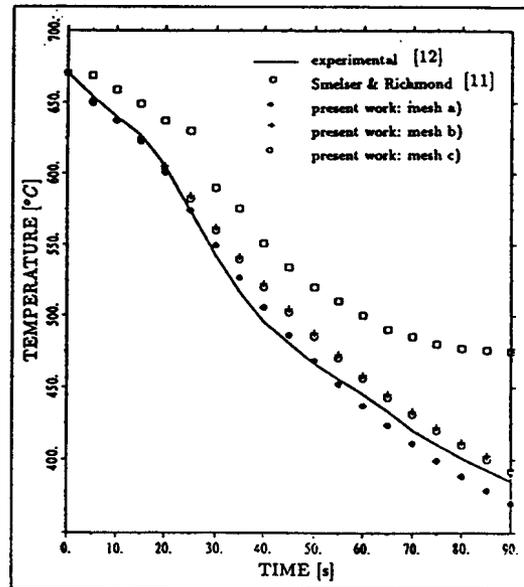


Figura 7. Test de solidificación: evolución de la temperatura en la superficie exterior de la pieza.

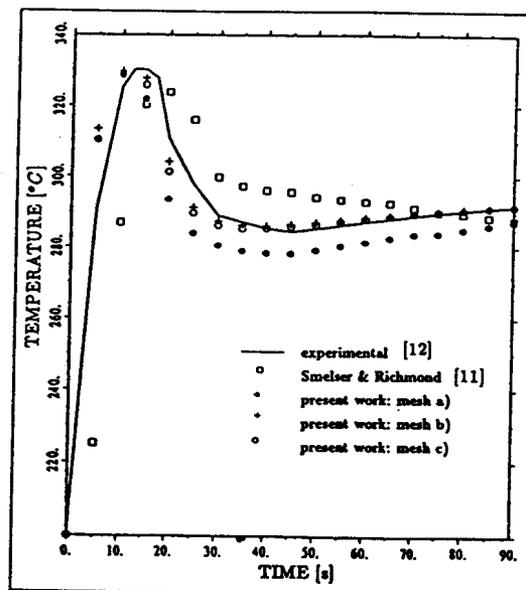


Figura 8. Test de solidificación: evolución de la temperatura en la superficie interior del molde.

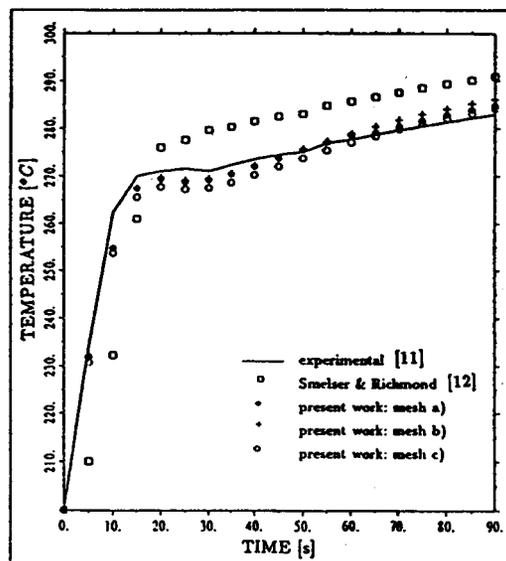


Figura 9. Test de solidificación: evolución de la temperatura en un punto situado a 8 mm desde la superficie interior del molde.

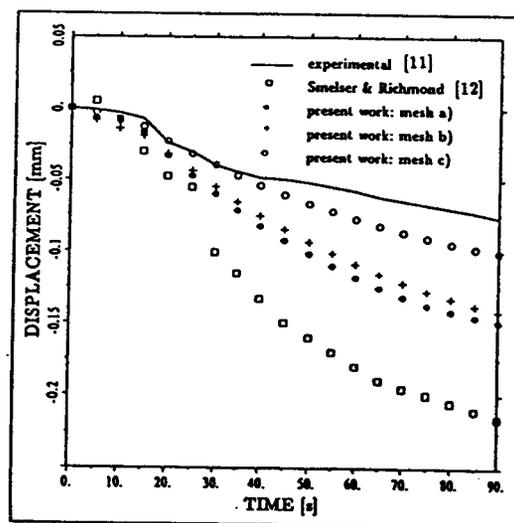


Figura 10. Test de solidificación: evolución del desplazamiento radial en la superficie exterior de la pieza.

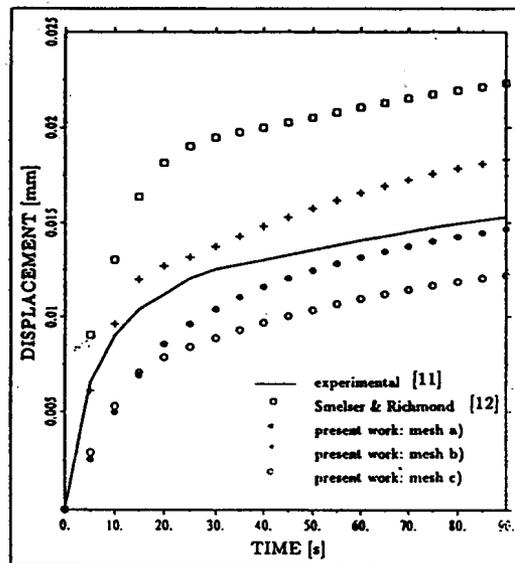


Figura 11. Test de solidificación: evolución del desplazamiento radial en la superficie interior del molde.

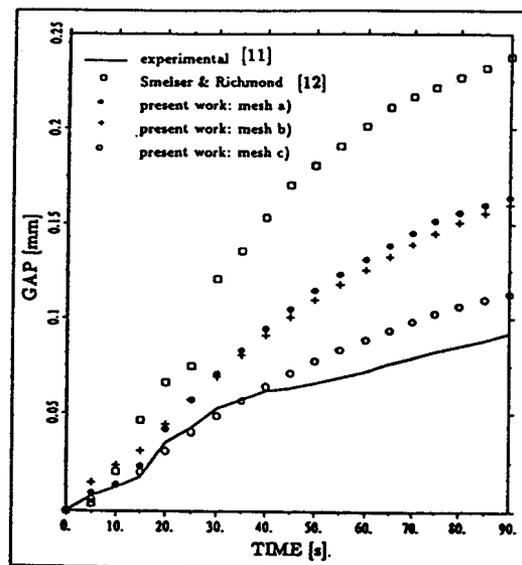


Figura 12. Test de solidificación: evolución de la abertura normal en la interfaz pieza-molde.