ANÁLISIS TERMO-MECÁNICO DE UN PROCESO DE COLADA CONTINUA EMPLEANDO EL MÉTODO DE GALERKIN LIBRE DE ELEMENTOS BAJO UNA DESCRIPCIÓN MIXTA EULERIANA-LAGRANGIANA

J. C. ÁLVAREZ HOSTOS¹, A. D. BENCOMO¹

¹ Departamento de Metalurgia Química, Facultad de Ingeniería-Universidad Central de Venezuela. e-mail: juancarlos.alvarezhostos@gmail.com, juan.alvarez.h@ucv.ve, alfonso.bencomo@gmail.com

Recibido: julio 2016

Aprobado para publicación: diciembre 2016

RESUMEN

El presente trabajo ha sido conducido con el objeto de desarrollar una solución alternativa a los problemas termo-mecánico y de transferencia de calor involucrados en un proceso de colada continua (CC) convencional, usando el método de Galerkin libre de elementos (MGLE). El balance de energía interna ha sido resuelto bajo una descripción Euleriana y acoplado con el balance de cantidad lineal de movimiento en la región sólida bajo una descripción mixta Euleriana-Lagrangiana. Las formulaciones débiles de ambas ecuaciones de conservación han sido adaptadas con el objeto de calcular las distribuciones axisimétricas de temperatura, esfuerzos y deformaciones sobre una palanquilla cilíndrica en CC. Las leyes constitutivas, de transporte, aspectos no lineales, variables trayecto-dependientes, construcción de las funciones de forma y condiciones de frontera han sido especificadas. Una explicación detallada de la implementación del MGLE en los problemas termo-mecánico y de transferencia de calor, ha sido también incluida. Los resultados han demostrado que esta técnica puede ser empleada exitosamente en el modelado de problemas termo-mecánicos de CC. La solución por medio de esta formulación ha demostrado la capacidad del MGLE para cuantificar con precisión cómo el comportamiento mecánico influencia la transferencia de calor debido a la brecha de aire molde-metal, mientras que la transferencia de calor influye en el comportamiento termo-mecánico por medio de las deformaciones térmicas.

Palabras clave: Galerkin libre de elementos, solidificación, colada continua, distribución esfuerzos, deformación inelástica

COUPLED THERMAL-STRESS ANALYSIS OF A CONTINUOUS CASTING PROCESS UNDER A MIXED EULERIAN-LAGRANGIAN DESCRIPTION, ON THE BASIS OF THE ELEMENT-FREE GALERKIN FORMULATION

ABSTRACT

The present work has been conducted in order to develop an alternative solution to the heat transfer and thermalmechanical problems involved in a conventional continuous casting (CC) process using the Element Free Galerkin (EFG) method. The Internal Energy Balance Equation has been solved under an Eulerian description and coupled to The Linear Momentum Balance Equation in the solid region under a mixed Eulerian-Lagrangian description. The weak-forms of both conservation equations have been adapted in order to compute the axisymmetric temperature and stress-strain distributions over a CC round billet. The constitutive laws, transport laws, nonlinear aspects, path dependent variables, shape functions construction and boundary conditions have been specified. A detailed explanation of the EFG method implementation in the heat transfer and thermal-mechanical problems has also been included. The results have demonstrated that this technique could be employed successfully in the modeling of CC thermal-mechanical problems. The solution by means of this formulation has demonstrated the ability of the EFG method to accurately quantify as the mechanical behavior (through the gap opening) influences heat transfer, while the heat transfer influences mechanical behavior through thermal strains.

Keywords: element free galerkin, solidification, continuous casting, stress distribution, inelastic strain

INTRODUCCIÓN

La colada continua (CC) es el proceso más común para la producción de acero. El proceso involucra un conjunto de parámetros tales como la temperatura y la velocidad de colada o temperatura del agua refrigerante, cuyas fluctuaciones pueden influir sobre la calidad del producto solidificado. La precisión y flexibilidad de estos parámetros puede ser lograda por medio de un estudio preliminar apropiado con base en modelos computacionales previos a la puesta en marcha del proceso. En años recientes, varios investigadores se han enfocado en resolver con mayor precisión los problemas termo-mecánico y de transferencia de calor con el uso de métodos numéricos basados en malla, tales como: el método de diferencias finitas (MDF), el método de volúmenes finitos (MVF) y especialmente el método de elementos finitos (MEF). El análisis de esfuerzos en el proceso de CC es un asunto mucho más complicado que el análisis térmico o de transferencia de calor. El último implica un balance energía interna, el cual resulta en una solución escalar, entiéndase temperatura, mientras que el análisis de esfuerzos implica un balance de cantidad lineal de movimiento, el cual conlleva a soluciones de campos vectoriales y tensoriales, tales como: distribuciones de desplazamientos, esfuerzos y deformaciones. (Souza, Peric y Owen, 2008) Varios autores (Dou et al., 2011; Zhang et al., 2011; Barcellos et al., 2010) han llevado a cabo estudios referentes a los mecanismos de transferencia de calor molde-metal, con base en modelos numéricos con el MDF, incluyendo aspectos no lineales. En el área de otros métodos numéricos convencionales, Xia et al. (2014) han simulado el comportamiento termomecánico de palanquillas y planchones, empleando el MEF bajo formulaciones Lagrangianas actualizadas. Song et al. (2014) han desarrollado un modelo termo-mecánico pseudotransitorio por superposición de cortes transversales, de un planchón en la región del molde empleando ANSYS®. Existen varios estudios sobre procesos de CC que emplean métodos numéricos basados en mallas. Sin embargo, estos enfoques podrían presentar algunas dificultades cuando las propiedades físicas y condiciones de frontera cambian con la temperatura. En el caso del MEF, la integración de dichas variables termo-dependientes, debe llevarse a cabo teniendo en cuenta las relaciones de conectividad entre los elementos. Además, si un solo elemento dentro de la aproximación del dominio abarca distintas fases, éste debe ser parcialmente integrado en cada una de estas. Una manera de lidiar con ese problema sería refinar la malla de la mejor manera posible y calcular las propiedades del material a la temperatura media de los nodos vinculados al elemento. Por otra parte, el MDF permite el cálculo

36

de las propiedades del material solo en las posiciones nodales, lo cual da lugar a una pérdida de precisión. Con el objeto de tratar efectivamente varios aspectos de no linealidad y dificultades inducidas por fronteras móviles, cambios de fase o singularidades, (Álvarez et al., 2016; Singh, 2004; Sarler, 2015; Rao y Rahman, 2000; Bordas et al. 2008; Hanoglu et al. 2011) nuevas formulaciones construidas totalmente en términos de un conjunto de nodos o partículas, conocidas como técnicas sin malla, han sido recientemente utilizadas por varios investigadores en la solución de problemas de fenómenos transporte y mecánica de sólidos. Particularmente en el área de la colada continua, algunos modelos numéricos de transferencia de calor han sido desarrollados con el empleo de métodos libres de malla como el Método de Colocación Local de Funciones Base Radiales (MCLFBR) (Vertnik y Sarler, 2009), el Método de Puntos Finitos (MPF) (Zhang et al. 2007) y el MGLE (Álvarez, Puchi y Bencomo, 2015). Algunas otras formulaciones termo-mecánicas, tal como la desarrollada por Zhang y colaboradores. (Zhang et al. 2007) con el empleo del Método sin Malla Local de Petrov-Galerkin (MMLPG), han mostrado resultados que exhiben gran concordancia con las características de las distribuciones de esfuerzos y deformaciones de procesos de CC de palanquillas de sección cuadrada. Entre las técnicas sin malla, el MGLE representa un enfoque novedoso basado en una formulación débil global, el cual ya ha sido validado en la solución de problemas estructurales (Liu, 2003). En este sentido, debido a su precisión y estabilidad numérica para resolver ecuaciones integrales, este enfoque sin malla podría ser empleado para predecir el desempeño de un proceso CC con el objeto de obtener una integración más robusta de los aspectos no lineales y no conservativos relacionados a las propiedades físicas y mecánicas termodependientes y con las contribuciones de deformación inelástica sobre el espesor solidificado (Álvarez, Puchi y Bencomo, 2015). En este trabajo, las ventajas del MGLE son empleadas en un problema acoplado en dos direcciones durante el proceso de CC. Para este propósito, se ha empleado un enfoque Lagrangiano para definir la relación constitutiva incremental del problema de termo-fluencia. Sin embargo, tales ecuaciones son integradas a través de un dominio Euleriano, lo cual implica un enfoque mixto Euleriano-Lagrangiano, como ha sido propuesto por Fachinotti y Cardona (2007). El modelo es también utilizado para estudiar el efecto del comportamiento mecánico de la palanquilla sobre la condición de enfriamiento en la frontera del problema de transferencia de calor, debido a la importante influencia de la brecha de aire sobre el mecanismo de transporte energético en la interfase moldemetal. Esta investigación propone un enfoque novedoso para modelar el comportamiento termo-mecánico de un proceso CC, logrando una integración robusta de las deformaciones no conservativas sin discretizar el dominio.

ECUACIONES GOBERNANTES

Desde el punto de vista físico, la CC del acero involucra un problema termo-mecánico acoplado en dos direcciones. La distribución de temperatura influye sobre la respuesta mecánica del continuo y viceversa. Por otra parte, algunos autores han asumido que la respuesta mecánica no tiene gran influencia en la distribución de temperaturas durante el avance del proceso, considerando las bajas tasas de deformación en la piel solidificada. En este sentido, existen distintos estudios orientados a prescribir el flujo de calor en la interfase molde-metal, con base en análisis inversos y soluciones semi-analíticas, previos a un análisis termomecánico. (Álvarez et al., 2015; Alizadeh et al., 2010; Fachinotti et al., 2007; Yamauchi et al., 2002) Asumiendo esto, se ha propuesto en varias comunicaciones previas la posibilidad de predecir el desempeño de un proceso de colada continua planteando un problema acoplado solo en una dirección. Sin embargo, el objeto de este trabajo de investigación consiste en la resolución del problema acoplando en dos direcciones las ecuaciones de energía y cantidad de movimiento, en modo de analizar la idoneidad de aquellos modelos acoplados solo en una dirección, donde se emplean expresiones que prescriban el flujo de calor previo al análisis termo-mecánico. En este trabajo se ha considerado particularmente el modelo propuesto por Yamauchi et al. (2002)

Balance de energía interna

El balance de energía interna en una descripción Euleriana estacionaria para un sistema incompresible considerando el calor latente de fusión debido a los cambios de fase puede ser expresado como:

$$\rho\left(c_{p}-H_{f}\frac{df_{s}}{dT}\right)\nu_{i}T_{,i}=\left(kT_{,i}\right)_{,i}$$
(1)

En este balance $H_f y f_s$ son el calor latente específico del cambio de fase y la fracción sólida, respectivamente. El término en paréntesis en el lado izquierdo de la ecuación se define como el calor específico efectivo. El balance de energía interna ha sido resuelto empleando la formulación libre de elementos de Galerkin presentada por Álvarez, Puchi y Bencomo (2015), la cual ha sido adaptada a una geometría axisimétrica, por medio de una simple transformación incluyendo la coordenada radial en las

ecuaciones integrales resultantes, esto es, el determinante del Jacobiano de la transformación de un sistema cartesiano a un sistema cilíndrico. Se debe señalar que, todas las propiedades físicas y de transporte son dependientes de la temperatura y para su cálculo se han empleado las correlaciones propuestas por Thomas *et al.* (2004), las cuales han sido implementadas exitosamente en una comunicación previa (Álvarez, Puchi y Bencomo, 2015).

Balance de cantidad lineal de movimiento

En virtud de los aspectos no lineales y no conservativos implicados en el problema termo-mecánico del proceso de CC, la ecuación de cantidad lineal de movimiento debe ser resuelta empleando un esquema global de Newton-Raphson hasta alcanzar la condición de equilibrio:

$$\left(\sigma_{ij}^{(\omega-1)} + d \sigma_{ij}^{(\omega)}\right)_{,j} + F_i = 0$$
⁽²⁾

donde, $d \sigma_{ij}^{(\omega)}$ representa la variación del tensor de esfuerzos en la iteración ω -ésima. El tensor de esfuerzos es calculado por medio de una función constitutiva instantánea, cuya condición inicial es determinada con la integración de las historia de deformación del sistema material (Souza, Peric y Owen, 2008), lo que significa $\sigma_{ij}|_{\varepsilon_{ij}^{\nu,\rho}} = \sigma_{ij}(\varepsilon_{ij}, T)$. La función constitutiva incremental es, en general, independiente de la historia de deformación y no lineal dentro de cada incremento de tiempo, esto es, $\sigma_{ij}|_{\varepsilon_{ij}^{(nei)}}$ es una función de $\varepsilon_{ij}|_{\varepsilon_{ij}^{(nei)}}$ y $T|_{\varepsilon_{ij}}$. Con base en lo anterior, es posible calcular la derivada de la función constitutiva incremental a ser implementada en el esquema global de Newton-Raphson, presentado en la Ec. (2) (Fachinotti y Cardona, 2007):

$$\left(\sigma_{ij}^{(\omega-1)} + \frac{\partial \hat{\sigma}_{ij}^{(\omega-1)}}{\partial \varepsilon_{kl}} d \varepsilon_{kl}^{(\omega)} \dots + \frac{\partial \hat{\sigma}_{ij}^{(\omega-1)}}{\partial T} dT^{(\omega)}\right)_{,j} + F_i = 0 \quad (3)$$

Es importante resaltar que, considerado la trayectoria rectilínea de los puntos materiales debido a la condición de pequeñas deformaciones y los bajos gradientes de temperatura en la dirección de colada, es posible obviar el tercer término entre paréntesis en la Ec. (3). La función constitutiva instantánea permite también determinar, de una manera incremental, la evolución de las cantidades no conservativas a través de la historia de deformaciones. El algoritmo de integración también define una función constitutiva incremental para el tensor de deformaciones visco-plásticas, y para la actualización inelástica del tensor de esfuerzos (Souza, Peric y Owen, 2008), tal como se expresa en las Ec. (4) y (5):

$$\varepsilon_{ij}^{\nu p}|_{t^{(n+1)}} = \hat{\varepsilon}_{ij}^{\nu p} \left(\varepsilon_{ij}|_{t^{(n+1)}}, T|_{t^{(n+1)}}, \varepsilon_{ij}^{\nu p}|_{t^{(n+1)}} \right)$$
(4)

$$\sigma_{ij}|_{t^{(n+1)}} = \hat{\sigma}_{ij} \left(\varepsilon_{ij}|_{t^{(n+1)}}, T|_{t^{(n+1)}}, \varepsilon_{ij}^{\nu p}|_{t^{(n)}} \right)$$
(5)

Ecuaciones constitutivas y contribuciones de deformación

Durante un proceso de CC, el espesor solidificado es sometido principalmente a tres contribuciones de deformación, entiéndase, elástica, visco-plástica y térmica; las cuales constituyen el tensor total de deformaciones del sistema material. Considerando que se espera que las máximas deformaciones se encuentren debajo de un 2% (Li y Thomas, 2004; Fachinotti y Cardona, 2007), la deformación total puede ser descompuesta como sigue:

$$\varepsilon_{ij} = \varepsilon_{ij}^e + \varepsilon_{ij}^{v\,p} + \varepsilon_{ij}^T \tag{6}$$

La generalización de la Ec. (6) no representa ningún problema cuando las deformaciones térmicas y elásticas permanecen pequeñas, dado que la deformación inelástica es la componente permanente asociada con la configuración relajada. Por lo tanto, el tensor de esfuerzos puede ser calculado por medio de la deformación elástica, la cual retiene la resistencia mecánica del material de forma cinemática. En este sentido:

$$\sigma_{ij} = C_{ijkl} \left(\varepsilon_{kl} - \varepsilon_{kl}^{vp} + \varepsilon_{kl}^{T} \right) \tag{7}$$

En la Ec. (7), C_{ijkl} es el tensor de constantes elásticas, el cual para materiales isótropos es $C_{ijkl}=2GI_{ijkl}^{S}+\lambda \delta_{ij} \delta_{kl}$, donde $I_{ijkl}^{S}=(\delta_{ik} \delta_{jl}+\delta_{il} \delta_{jk})/2$ y δ_{ij} son el tensor simétrico identidad de cuarto orden y el delta de Kronecker, respectivamente. Las constantes de Lamé G y λ son cantidades dependientes de la temperatura, las cuales pueden ser calculadas en términos del módulo de Young E(T) y la relación de Poisson v(T) como G(T) = E/2(1+v) y $\lambda(T) = Ev/(1+v)(1-2v)$. Adicionalmente la deformación térmica se define como:

$$\varepsilon_{ij}^{T} = \left[\int_{T^{(0)}}^{T^{(n+1)}} \alpha(\tau) d\tau \right] \delta_{ij} \dots$$

$$= \left[\sum_{I=0}^{n} \sqrt[3]{\rho(T^{(I)})} / \rho(T^{(I+1)}) - 1 \right] \delta_{ij}$$
(8)

Donde $T^{(n+1)}$ representa la temperatura de una partícula genérica X al tiempo $t^{(n+1)}$, esto es, $T^{(n+1)} = T(X|_{t^{(n+1)}})$; mientras que ρ y α_{τ} son la densidad y el coeficiente de

dilatación térmica, mientras que $T^{(0)}$ es una temperatura de referencia. Por otra parte, la deformación visco-plástica se calcula de acuerdo con una regla de flujo plástico asociativa, lo que significa que el potencial plástico es la función de fluencia. El criterio de von Mises es el más ampliamente utilizado para definir la función de fluencia para metales:

$$F(\sigma_{ij},\sigma_{Y}) = \sqrt{\frac{3}{2}\sigma'_{ij}\sigma'_{ij}} - (\sigma_{Y} + R(\varepsilon^{-\nu p}))$$
(9)

donde, $\sigma_{ij} = \sigma_{ij} - \sigma_{kk} \delta_{ij}/3$, es la componente desviadora del tensor de esfuerzos y $R(\varepsilon^{-vp})$ cuantifica el endurecimiento isótropo en el espacio de los esfuerzos. σ_y es el esfuerzo de fluencia inicial, el cual es comúnmente una función de la temperatura, tasa de deformación y microestructura del material. Una regla asociativa de flujo inelástico basada en el criterio de von Mises se expresa como:

$$\dot{\varepsilon}_{ij}^{\nu p} = \dot{\gamma} \frac{3}{2} \frac{\sigma'_{ij}}{\bar{\sigma}^{\nu m}} \tag{10}$$

donde, \dot{Y} es parámetro escalar positivo, conocido como multiplicador plástico. Esta regla de flujo exhibe un conjunto de características tales como: (i) la deformación inelástica no da lugar a cambios de volumen en el material; (ii) el tensor de deformaciones inelásticas es ortogonal a la superficie de fluencia de von Mises y por lo tanto co-lineal con la componente desviadora del tensor de esfuerzos; y (iii) el multiplicador plástico coincide con la tasa de deformación plástica efectiva. La deformación inelástica de un punto material X en el instante $t^{(n+1)}$ se define a través de la historia de deformación del metal solidificado como:

$$\varepsilon_{ij}^{\nu p}(X)|_{t^{(n+1)}} = \int_{0}^{t^{(n+1)}} \dot{\varepsilon}_{ij}^{\nu p}(X,\tau) d\tau$$
(11)

Integración en la trayectoria de las contribuciones de deformación

El problema termo-mecánico en el proceso de CC puede ser formulado bajo un enfoque mixto Euleriano-Lagrangiano (Fachinotti y Cardona, 2007), con un esquema de integración por trayectoria, como se ilustra en la Figura 1. Esto significa que el problema con valores en la frontera para la distribución de esfuerzos y deformaciones es formulado bajo una descripción Euleriana sobre un conjunto de nodos fijos, mientras que las ecuaciones constitutivas y variables no conservativas son integradas sobre puntos materiales, los cuales ocupan instantáneamente diferentes posiciones a través de sus trayectorias, lo que significa, empleando una descripción Lagrangiana. Por lo tanto, considerando un punto material en específico $X^{(n+1)}$ en el momento $X^{(n+1)}_{t^{(n+1)}}$, la posición $t^{(n + 1)}$, definido como instantánea de este punto sobre el dominio Euleriano es $\vec{x}(X^{(n+1)}|_{t^{(n+1)}})$. Además, es evidente que este punto material alcanza esta condición luego de ocupar posiciones genéricas previas en instantes genéricos previos $t^{(l)}$, esto es $\vec{x} \left[X^{(n+1)} \right]_{t^{(n+1)}}$. Por lo tanto, con el objeto de definir $\vec{X}(X^{(n+1)}|_{t^{(n+1)}})$ en un enfoque totalmente Lagrangiano, sería necesario seguir la travectoria de cada punto material, con el objeto de registrar la evolución de las variables no conservativas durante su descenso. Este enfoque requiere del conocimiento de las configuraciones del dominio material en cada instante $t^{(l)}$ previo a $t^{(n+1)}$, lo cual es usualmente algo complejo. Sin embargo, el último inconveniente puede ser superado al asumir que todas las partículas sólidas se mueven axialmente con velocidad uniforme. Así, la historia termomecánica de cada partícula puede ser seguida por medio de otros puntos materiales $X^{(l)}$ que actualmente ocupan la misma coordenada espacial previamente recorrida por $X^{(n+1)}$ en la configuración material genérica previa $t^{(l)}$, por lo que $\vec{x} \left(X^{(n+1)} \Big|_{t^{(n)}} \right) = \vec{x} \left(X^{(l)} \Big|_{t^{(n+1)}} \right)$.

En consecuencia, el tensor de deformaciones inelásticas (11) y la deformación inelástica equivalente pueden ser calculados a través de las trayectorias axiales en el dominio Euleriano como sigue:

$$\varepsilon^{-\nu p}(X)|_{t^{(n+1)}} \cong \sum_{I=1}^{n+1} \Delta \gamma (X^{(I)}|_{t^{(n+1)}})$$
(12)

$$\varepsilon_{ij}^{\nu p}(X^{(n+1)})|_{t^{(n+1)}} \approx \sum_{I=1}^{n+1} \frac{3}{2} \Delta \gamma (X^{(I)}|_{t^{(n+1)}}) \frac{\sigma_{ij}^{'}(X^{(I)}|_{t^{(n+1)}})}{\sigma^{-\nu m}(X^{(I)}|_{t^{(n+1)}})}$$
(13)



Figura 1. Esquema de integración sobre trayectorias en el dominio Euleriano

Cálculo de esfuerzos y deformaciones, el algoritmo regresivo de transformación visco-plástica

El cálculo de esfuerzos implementado en este trabajo, comprende un paso de predicción elástica y un paso regresivo de transformación visco-plástica. El paso de predicción elástica es establecido asumiendo solo deformación elástica de una partícula $\vec{x} (X^{(n+1)}|_{t^{(n+1)}})$, dentro de un intervalo de tiempo $[t^{(n)}, t^{(n+1)}]$. Así, sobre el dominio espacial, es adecuado establecer respecto al tensor de deformación visco-plástica, que $\varepsilon_{ij}^{vp(Prueba)} (X^{(n+1)}|_{t^{(n+1)}}) = \varepsilon_{ij}^{vp} (X^{(n)}|_{t^{(n+1)}})$, lo cual permite el cálculo del esfuerzo de prueba como sigue:

$$\sigma_{ij}^{(Prueba)}(\vec{x}^{(n+1)})...$$

= $C_{ijkl}\left[\varepsilon_{kl}(\vec{x}^{(n+1)})...$
 $-\varepsilon_{kl}^{vp}(\vec{x}^{(n)}) - \varepsilon_{kl}^{T}(\vec{x}^{(n)})\right]$ (14)

donde $\vec{x}^{(I)} = \vec{x} \left(X^{(I)} \Big|_{t^{(n+1)}} \right)$. Es importante señalar que, en principio, $\Delta \gamma \left(\vec{x}^{(n+1)} \right)$ es una variable desconocida. Además, si en la Ec. (9), $F \left(\sigma_{ij}^{(Prueba)}, \sigma_Y \right) < 0$, entonces, $\Delta \gamma = 0$ y $\sigma_{ij} = \sigma_{ij}^{(Prueba)}$. En el caso contrario, $\Delta \gamma$ debe ser calculado por medio del paso regresivo de transformación visco-plástica. El multiplicador plástico puede ser calculado resolviendo la siguiente ecuación escalar no lineal:

$$\sigma^{-\nu m}(\vec{x}^{(n+1)}) - \sigma^{-\nu m(Prueba)}(\vec{x}^{(n+1)}) + 3 G \Delta \gamma(\vec{x}^{(n+1)}) = 0$$
(15)

En la Ec. (15), el esfuerzo efectivo de von Mises debe ser expresado como una función del multiplicador plástico, por lo que es necesario definir un modelo constitutivo para las distintas fases que pueden presentarse durante la solidificación. Particularmente en este trabajo, el flujo viscoplástico es descrito por diferentes modelos constitutivos, de acuerdo a las fases involucradas en cada punto material. Las propiedades elásticas y los modelos de flujo viscoplástico dependientes de la temperatura empleados para las fases ferrita^δ y austenita^γ, corresponden a aquellos propuestos por Li y Thomas (Li y Thomas, 2004). Una vez calculado el multiplicador plástico se puede completar la transformación visco-plástica regresiva por medio de las siguientes ecuaciones de corrección para el tensor de esfuerzos:

$$\sigma_{ij}(\vec{\mathbf{x}}^{(n+1)}) = \sigma'_{ij}(\vec{\mathbf{x}}^{(n+1)}) + \frac{\sigma_{kk}^{(Prueba)}(\vec{\mathbf{x}}^{(n+1)})}{3} \delta_{ij}$$
(17)

FORMULACIÓN DE GALERKIN LIBRE DE ELEMENTOS

La formulación débil de Galerkin pertenece a la familia de los métodos de residuos ponderados. Particularmente, el MGLE posee las siguientes características (Liu, 2003): (i) Aproximaciones por mínimos cuadrados móviles son utilizadas para construir las funciones de forma; (ii) la formulación débil de Galerkin es empleada para desarrollar el sistema discreto de ecuaciones; (iii) celdas en una malla de soporte son requeridas para llevar a cabo la integración asociada al cálculo de las matrices del sistema.

Construcción de las funciones de forma por mínimos cuadrados móviles

Considerando una función $u(\vec{x})$ que representa un campo escalar o vectorial en un dominio Ω , esta función puede ser aproximada como:

$$u(\vec{x}) \simeq \sum_{I=1}^{m} P_{I(\vec{x})} a_{I(\vec{x})} = \left[P_{(x)}^{m} \right]^{T} a_{(x)}^{m}$$
(18)

donde $P_{(\bar{x})}^m$ es un vector de funciones base y $a_{(\bar{x})}^m$ es un vector de coeficientes que también son funciones de la posición dentro del dominio. La forma de los coeficientes se puede obtener utilizando una función de aproximación en un conjunto de nodos cuyos dominios de influencia constituyen el soporte de la variable de campo en una posición genérica \vec{x} . (Liu, 2003) Para este propósito, se puede construir un funcional de mínimos cuadrados móviles usando los valores de los parámetros nodales distribuidos en el dominio del problema:

$$J = \sum_{I=1}^{n} W_{(\vec{x} - \vec{x}_{I})} \Big[\Big[P^{m}_{(\vec{x}_{I})} \Big]^{T} a^{m}_{(\vec{x}_{I})} - u_{I} \Big]^{2}$$
(19)

Donde $W_{(\bar{x}-\bar{x}_l)}$ es una función de soporte compacto, y u_l es el parámetro nodal de la variable de campo, el cual no satisface la propiedad del delta de Kronecker, debido la naturaleza no interpoladora del funcional J. La función de forma se obtiene minimizando el funcional J para obtener los coeficientes $a_{(\bar{x})}^m$:

$$u_{(\vec{x})} \approx \sum_{I=1}^{n} \left[P_{(\vec{x})}^{m} \right]^{T} \left[A_{(\vec{x})}^{m \times m} \right]^{-1} B_{(\vec{x}_{I})}^{m} u_{I}$$
(20)

donde:

$$A_{(\bar{x})}^{m \times m} = \sum_{i=1}^{n} W_{(\bar{x} - \bar{x}_{i})} P_{(\bar{x}_{i})}^{m} \left[P_{(\bar{x}_{i})}^{m} \right]^{T}$$
(21)

$$B_{(\vec{x}_{l})}^{m} = W_{(\vec{x} - \vec{x}_{l})} P_{(\vec{x}_{l})}^{m}$$
(22)

Implementación del método en el balance de energía interna

La formulación débil del balance de energía interna, por simplicidad se puede escribir en forma vectorial como:

$$\int_{\Omega} \psi \rho c_{p}(\vec{\nu})^{T} \nabla T \, d\Omega + \int_{\Omega} (\nabla \psi)^{T} k \nabla T \, d\Omega \dots + \int_{\Gamma} \psi h (T - T_{\infty}) d\Gamma \dots - \int_{\Omega} \psi Q \, d\Omega \dots$$

$$= \int_{\overline{\Gamma}} \eta (T - \overline{T}) \, d\overline{\Gamma} + \int_{\overline{\Gamma}} \psi \lambda \, d\overline{\Gamma}$$
(23)

donde Ψ y η son las funciones de ponderación asociadas a la temperatura y a los multiplicadores de Lagrange, respectivamente. Por otra parte, Ω y Γ representan el dominio del problema y sus fronteras, mientras que $\overline{\Gamma}$ corresponde solo a aquellas fronteras donde haya condiciones esenciales impuestas. Luego de aproximar tanto la función de ponderación como la variable de campo con las funciones de forma construidas por mínimos cuadrados móviles (20), la formulación débil (23) resulta como:

$$\sum_{i=1}^{n} \sum_{j=1}^{n} \psi_{i} \left[\underbrace{\int_{\Omega} \rho c_{p} \varphi_{i(\bar{x})}(\vec{v})^{T} \beta_{j(\bar{x})}^{3\times 1} d\Omega}_{P_{g}} \right] T_{j} \cdots$$

$$+ \sum_{i=1}^{n} \sum_{j=1}^{n} \psi_{i} \left[\underbrace{\int_{\Omega} (\beta_{i(\bar{x})}^{3\times 1})^{T} k \beta_{j(\bar{x})}^{3\times 1} d\Omega}_{K_{g}} \right] T_{j} \cdots$$

$$+ \sum_{i=1}^{n} \sum_{j=1}^{n} \psi_{i} \left[\underbrace{\int_{\Gamma} h \varphi_{i(\bar{x})} \varphi_{j(\bar{x})} d\Gamma}_{R_{g}} \right] T_{j} \cdots$$

$$- \sum_{i=1}^{n} \psi_{i} \left[\underbrace{\int_{\Gamma} h T_{\infty} \varphi_{i(\bar{x})} d\Gamma}_{Q^{g}} \right] \cdots$$

$$- \sum_{i=1}^{n} \psi_{i} \left[\underbrace{\int_{\Omega} Q \varphi_{i(\bar{x})} d\Omega}_{Q^{g}} \right] \cdots$$

$$= \int_{\Gamma} \eta (T - \overline{T}) d\Gamma + \int_{\Gamma} \psi \lambda d\Gamma$$

$$(2)$$

donde $\beta_{j(\vec{x})}^{3\times 1} = \nabla \varphi_{i(\vec{x})}$. Los términos faltantes, relacionados a la imposición de las condiciones de frontera esenciales, son desarrollados con el uso de polinomios interpoladores de Lagrange (Liu, 2003):

$$\lambda(s) \approx \sum_{j=1}^{n_{\lambda}} N_j(s) \lambda_j$$
(25)

De esta manera, la imposición de las condiciones esenciales, puede ser aproximada como sigue:

$$\int_{\Gamma} \psi \lambda \, d \, \overline{\Gamma} \simeq \sum_{i=1}^{n} \sum_{j=1}^{n_{\lambda}} \psi_{i} \left[\int_{\Gamma} \psi_{i(\overline{x})} N_{j}(s) \, d \, \overline{\Gamma} \right] \lambda_{j} \quad (26)$$

$$\int_{\Gamma} \eta \, (T - \overline{T}) \, d \, \overline{\Gamma} \simeq \sum_{i=1}^{n_{\lambda}} \sum_{j=1}^{n} \eta_{i} \left[\int_{\Gamma} N_{i}(s) \, \varphi_{j(\overline{x})} \, d \, \overline{\Gamma} \right] T_{j} \quad (27)$$

$$- \sum_{i=1}^{n_{\lambda}} \eta_{i} \left[\int_{\Gamma} N_{i}(s) \, \overline{T} \, d \, \overline{\Gamma} \right] \quad (27)$$

Finalmente, la formulación resulta como:

$$\sum_{i=1}^{n} \sum_{j=1}^{n} \psi_{i} (P_{ij} + K_{ij} + R_{ij}) T_{j} + \sum_{i=1}^{n} \sum_{j=1}^{n} \psi_{i} G_{ij} \lambda_{j} \dots + \sum_{i=1}^{n} \sum_{j=1}^{n} \eta_{i} G_{ji} T_{j} \dots$$

$$= \sum_{i=1}^{n} \psi_{i} (Q_{i}^{R} + Q_{i}^{G}) + \sum_{i=1}^{n} \eta_{i} q_{i}$$
(28)

Las sumatorias del sistema (28), pueden ser reordenadas en vectores y matrices, resultando en el siguiente sistema de ecuaciones:

$$\begin{bmatrix} P^{n \times n} + K^{n \times n} + R^{n \times n} & G^{n \times n_{\lambda}} \\ [G^{n \times n_{\lambda}}]^{T} & 0 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} T^{n} \\ \lambda^{n_{\lambda}} \end{bmatrix} \cdots$$

$$= \begin{bmatrix} Q^{n}_{R} + Q^{n}_{G} \\ q^{n_{\lambda}} \end{bmatrix}$$
(29)

24)

Implementación del método en el balance de cantidad lineal de movimiento

La formulación débil de la Ec. (3), puede expresarse en términos de un arreglo de vectores y matrices, con el uso de la notación de Voigt:

$$\int_{\Omega} [L^{6\times3} \vec{\psi}]^{T} \frac{\partial \bar{\sigma}^{(\omega-1)^{6\times6}}}{\partial \bar{\epsilon}} L^{6\times3} d\vec{u}^{(\omega)} d\Omega \dots
+ \int_{\Omega} [L^{6\times3} \vec{\psi}]^{T} \bar{\sigma}^{(\omega-1)^{6\times1}} d\Omega \dots
- \int_{\Gamma} [\vec{\psi}]^{T} \vec{t} d\Gamma - \int_{\Omega} [\vec{\psi}]^{T} \vec{F} d\Omega \dots
= \int_{\Gamma} [\vec{\eta}]^{T} (d\vec{u}^{(\omega)} - d\vec{u}) d\bar{\Gamma} \dots
+ \int_{\Gamma} [\vec{\psi}]^{T} \vec{\lambda} d\bar{\Gamma}$$
(30)

donde $\vec{\psi}$ y $\vec{\eta}$ son las funciones de ponderación asociadas a los desplazamientos y a los multiplicadores de Lagrange, respectivamente. Por otra parte, Ω y Γ representan el dominio del problema y sus fronteras, mientras que $\overline{\Gamma}$ corresponde solo a aquellas fronteras donde haya condiciones esenciales impuestas. Las funciones de forma desarrolladas por mínimos cuadrados móviles son empleadas esta vez para aproximar variables de campo vectoriales correspondientes al desplazamiento y a su función de ponderación asociada:

$$d\vec{u} \approx \sum_{i=1}^{n} \begin{bmatrix} \varphi_{i(x)} & 0 & 0 \\ 0 & \varphi_{i(\bar{x})} & 0 \\ 0 & 0 & \varphi_{i(x)} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} du_{xi} \\ du_{yi} \\ du_{zi} \\ du_{zi} \end{bmatrix}$$

$$\vec{\psi} \approx \sum_{i=1}^{n} \begin{bmatrix} \varphi_{i(x)} & 0 & 0 \\ 0 & \varphi_{i(x)} & 0 \\ 0 & 0 & \varphi_{i(x)} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \psi_{xi} \\ \psi_{yi} \\ \psi_{yi} \\ \psi_{zi} \end{bmatrix}$$
(31)

De acuerdo a lo anterior, la formulación débil es aproximada como sigue:

$$\sum_{i=1}^{n} \sum_{j=1}^{n} [\psi_{i}^{3\times1}]^{T} \underbrace{\left[\int_{\Omega} (\beta_{i(\bar{x})}^{6\times3})^{T} \frac{\partial \bar{\sigma}^{(\omega-1)^{6\times6}}}{\partial \bar{\epsilon}} \beta_{j(\bar{x})}^{6\times3} d\Omega \right] dU_{j}^{(\omega)}}_{K_{i}^{3\times3}} - \sum_{i=1}^{n} [\psi_{i}^{3\times1}]^{T} \underbrace{\left[\int_{\Omega} \varphi_{i(\bar{x})}^{3\times3} \vec{F} \, d\Omega \right]}_{Q_{i}^{(F)\times i}} \cdots - \sum_{i=1}^{n} [\psi_{i}^{3\times1}]^{T} \underbrace{\left[\int_{\Gamma} \varphi_{i(\bar{x})}^{3\times3} \vec{f} \, d\Gamma \right]}_{Q_{i}^{(F)\times i}} \cdots + \sum_{i=1}^{n} [\psi_{i}^{3\times1}]^{T} \underbrace{\left[\int_{\Omega} (\beta_{i(\bar{x})}^{6\times3})^{T} \sigma^{(\omega-1)^{6\times i}} d\Omega \right]}_{Q_{i}^{(0)\times i}} \cdots = \int_{\Gamma} [\vec{\eta}]^{T} (d\vec{u}^{(\omega)} - d\vec{\bar{u}}) d\bar{\Gamma} + \int_{\Gamma} [\vec{\psi}]^{T} \vec{\lambda} \, d\bar{\Gamma}$$

$$(33)$$

Donde $\beta_{i(\hat{x})}^{6\times3} = L^{6\times3} \varphi_{i(\hat{x})}^{3\times3}$. Los multiplicadores de Lagrange necesarios para satisfacer las condiciones esenciales expresadas en los dos últimos términos de la Ec. (33)

son de naturaleza vectorial, de modo que sus polinomios interpoladores se deben expresar como en Ec 34. (Liu, 2003)

$$\vec{\lambda} \simeq \sum_{i=1}^{n} \begin{bmatrix} N_{i}(s) & 0 & 0\\ 0 & N_{i}(s) & 0\\ 0 & 0 & N_{i}(s) \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \lambda_{xi} \\ \lambda_{yi} \\ \lambda_{zi} \\ \lambda_{zi} \\ \lambda_{zi}^{3\times 1} \end{bmatrix}$$
(34)

Así, la imposición de las condiciones de frontera esenciales puede ser aproximada como sigue:

$$\int_{\Gamma} [\vec{\psi}]^{T} \vec{\lambda} d\bar{\Gamma}$$

$$\approx \sum_{i=1}^{n} \sum_{j=1}^{n_{\lambda}} [\psi_{i}^{3\times1}]^{T} \left[\int_{\Gamma} \varphi_{i(x)}^{3\times3} N_{j(s)}^{3\times3} d\bar{\Gamma} \right] \lambda_{j}^{3\times1} \qquad (35)$$

$$\int_{\Gamma} [\vec{\eta}]^{T} \left(d\vec{u}^{(\omega)} - d\vec{u} \right) d\hat{\Gamma}$$

$$\approx \sum_{i=1}^{n} \sum_{j=1}^{n} [\eta_{i}^{3\times1}]^{T} \left[\int_{\Gamma} N_{i(s)}^{3\times3} \varphi_{j(\bar{x})}^{3\times3} d\bar{\Gamma} \right] dU_{j}^{(\omega)3\times1}$$

$$- \sum_{i=1}^{n_{\lambda}} [\eta_{i}^{3\times1}]^{T} \left[\int_{\Gamma} N_{i(s)}^{3\times3} d\vec{u} d\bar{\Gamma} \right]$$

$$(36)$$

Finalmente, la formulación resulta como:

$$\sum_{i=1}^{n} \sum_{j=1}^{n} [\psi_{i}^{3\times1}]^{T} K_{ij}^{3\times3} dU_{j}^{(\omega)3\times1} \dots + \sum_{i=1}^{n} \sum_{j=1}^{n_{i}} [\psi_{i}^{3\times1}]^{T} G_{ij}^{3\times3} \lambda_{j}^{3\times1} \dots + \sum_{i=1}^{n_{i}} \sum_{j=1}^{n} [\eta_{i}^{3\times1}]^{T} G_{ji}^{3\times3} dU_{j}^{(\omega)3\times1} \dots = \sum_{i=1}^{n} [\psi_{i}^{3\times1}]^{T} [Q_{i}^{(F)3\times1} + Q_{i}^{(t)3\times1} - Q_{i}^{(\sigma)3\times1}] \dots + \sum_{i=1}^{n} [\eta_{i}^{3\times1}]^{T} q_{i}^{3\times1}$$
(37)

Las sumatorias del sistema (37) se reordenan en un arreglo de vectores y matrices, resultando en el siguiente sistema lineal de ecuaciones:

$$\begin{bmatrix} K^{3n\times3n} & G^{3n\times3n_{\lambda}} \\ [G^{3n\times3n_{\lambda}}]^{T} & 0 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} dU^{(\omega)3n} \\ \lambda^{3n_{\lambda}} \end{bmatrix} \cdots \\ = \begin{bmatrix} Q_{t}^{3n} + Q_{F}^{3n} - Q_{\sigma}^{3n} \\ q^{3n_{\lambda}} \end{bmatrix}$$
(38)

ACOPLAMIENTO DE AMBAS FORMULACIONES EN EL PROCESO DE CC

La solución del problema termo-mecánico requiere del conocimiento de la distribución de temperaturas obtenida al resolver la ecuación de energía interna, como se propone en la Ec. (29). Este sistema, ha sido resuelto adaptando la formulación del MGLE a la geometría axisimétrica de una palanquilla cilíndrica. El mecanismo de transferencia de calor en la superficie de la palanquilla es impuesto por medio de una condición de enfriamiento de Robin, la cual incluye un coeficiente efectivo de transferencia de calor que implica la convección del agua refrigerante dentro del molde, la conducción dentro de las paredes del molde, la resistencia de contacto asociada a las oscilaciones del molde, y las resistencias conductivas y radiativas en la brecha de aire formada por la contracción térmica de la palanquilla durante la solidificación (efecto termo-mecánico). (Li y Thomas, 2004) Una vez resuelto el problema de transferencia de calor, la distribución de temperaturas obtenida permitirá definir la región sólida del dominio y el valor de los términos dependientes de la temperatura en el problema termo-mecánico en modo de llevar a cabo el ensamblaje y la solución del sistema (38) y así estimar nuevamente la brecha de aire entre el molde y la superficie del metal sólido. En este sentido, solo un modelo acoplado en dos direcciones resulta adecuado para cuantificar el efecto de la brecha de aire en el flujo de calor, así como también de la distribución de temperaturas sobre la formación de la brecha de aire. Se debe señalar que el dominio sólido alcanza un espesor de apenas 2,5 cm aproximadamente a la salida del molde, por lo que las dimensiones en las figuras referentes al análisis termomecánico serán reportadas en milímetros, mientras que las del balance de energía interna en centímetros, considerando que este último comprende las regiones sólidas y líquidas del problema. El problema de transferencia de calor ha sido resuelto bajo las siguientes condiciones: (i) Se emplea una descripción Euleriana para resolver el balance de energía interna; (ii) Las propiedades del material y la condición de enfriamiento de Robin exhiben una notable dependencia con la temperatura; (iii) El incremento en la transferencia de calor en el seno del metal líquido debido a la convección, es cuantificado con el empleo de una conductividad térmica efectiva, como ha sido propuesto por Zhang et al.,2011; (iv) las propiedades físicas y de transporte son calculadas considerando un modelo de fracciones ponderadas. En base a lo anteriormente expuesto, la condición de enfriamiento de Robin se define por medio de un coeficiente de transferencia de calor por convección efectivo, el cual se puede expresar como sigue:

$$R_{T}... = \frac{1}{h_{w}} + \frac{d_{m}}{k_{m}} ... + \frac{d_{aire}/k_{aire} + R_{c}}{1 + \sigma (T_{s} + T_{m}) (T_{s}^{2} + T_{m}^{2}) (d_{aire}/k_{aire} + R_{c})/(1/e_{s} + 1/e_{m})}$$
(39)

donde h_w representa el coeficiente de convección del agua dentro del molde, d_m y k_m son el espesor y la conductividad térmica del molde, mientras que d_{aire} y k_{aire} son el espesor de la brecha y la conductividad térmica del aire, respectivamente. Las temperaturas superficiales externas y emisividades del molde y la palanquilla son representadas por T_m , T_s , e_m y e_s . De acuerdo a la Figura 2, el problema de transferencia de calor ha sido definido bajo las siguientes condiciones de frontera:

$$-k \frac{\partial T}{\partial r}\Big|_{(R,z)} = h_{eff}(T_{(R,z)} - T_w) \qquad Cond. de Robin \quad (40)$$

$$T|_{(r,0)} = T_C \qquad Cond. de Dirichlet \qquad (41)$$

Por otra parte, el modelo termo-mecánico ha sido resuelto bajo las siguientes consideraciones: (i) Una descripción Euleriana es empleada para resolver la ecuación de cantidad lineal de movimiento; (ii) La presión metalostática es impuesta en la isoterma solidus; y (iii) Se asume una trayectoria totalmente axial de las partículas bajo una condición de pequeñas deformaciones, lo que permite establecer claramente el camino para la integración Lagrangiana. De acuerdo a la Figura 2, las condiciones de frontera implementadas en el problema termo-mecánico son:

$$u_z(r, L) = 0$$
 Cond. de Dirichlet (42)

$$u_r(0,z)=0$$
 Cond. de Dirichlet (43)

$$\left[\overline{\tau} \, . \, \hat{n}\right]_{(R-M|z|,z)} = \rho g z \, \hat{n}$$
 Cond. de Neumann (44)

La condición natural en la Ec. (44) está asociada a la presión ferrostática en la interfaz sólido-líquido M(z). En cuanto a la solución de ambos problemas por el MGLE, el vector de funciones base empleado en la Ec. (18) consiste en tres funciones base monomiales (m=3). Los multiplicadores de Lagrange son aproximados con polinomios interpoladores de primer orden, definidos por las longitudes de arco a lo largo de las condiciones esenciales entre dos nodos localizados antes y después de un arco genérico s:

$$P^{3}_{|\vec{x}|} = [1 \quad x \quad y]^{T}$$
(45)

$$N_{0(s)} = \frac{(s - s_1)}{(s_0 - s_1)} \qquad N_{1(s)} = \frac{(s - s_0)}{(s_1 - s_0)} \tag{46}$$



Figura 2. Dominio del modelo y condiciones de frontera

Las funciones de soporte compacto empleadas consisten en trazadores cúbicos sobre dominios de influencia rectangulares:

$$W_{[\bar{x}-\bar{x}_i]} = W_{rx} W_{ry} \qquad r_{(x,y)} = \frac{\|(x,y) - (x_i, y_i)\|}{d_{m(x,y)}}$$
(47)

$$W_{|\bar{x}-\bar{x}_{i}|} \cdots = \begin{cases} \frac{2}{3} - 4r_{(x,y)}^{2} - 4r_{(x,y)}^{3} & r_{(x,y)} \leq \frac{1}{2} \\ \frac{4}{3} - 4r_{(x,y)} + 4r_{(x,y)}^{2} - \frac{4}{3}r_{(x,y)}^{3} & \frac{1}{2} < r_{(x,y)} \leq 1 \\ 0 & r_{(x,y)} > 1 \end{cases}$$
(48)

La representación del dominio, el ensamblaje de los sistemas de ecuaciones (29) y (38); el cálculo de las integrales involucradas empleando un esquema de integración numérica por cuadratura de Gauss y la solución de las ecuaciones algebraicas, requirieron de la codificación de un algoritmo computacional, el cual fue desarrollado en el editor del lenguaje Matlab®.

ALGORITMO EMPLEADO

Considerando la cantidad de aspectos no lineales, presentes en el dominio del problema y sus fronteras; un método predictor-corrector ha sido empleado para determinar la distribución de temperaturas y el crecimiento del espesor solidificado en el problema de colada continua.

Para iniciar los cálculos, se realiza un primer estimado resolviendo un sistema lineal, considerando el coeficiente de transferencia convectivo, y las propiedades físicas y de transporte constantes. Posteriormente, con la distribución obtenida, se estiman todas las cantidades que representan los aspectos no lineales del problema; se resuelve el sistema obtenido y se obtiene una nueva distribución. El proceso se repite en una siguiente iteración evaluando todos los parámetros a las temperaturas promedio entre el último campo postulado y la solución actual del sistema. El ciclo continúa, hasta que el error relativo entre ambos campos de temperaturas alcance una tolerancia establecida. Como criterio de convergencia se consideró un error relativo e(pct) < 0,1 %. El error relativo de la solución numérica se define como (Xue-Hong y Wen-Quan, 2008):

$$e(pct) \simeq \frac{\sqrt{\sum_{j=1}^{N} (T_s^i - T_p^i)^2}}{\sum_{j=1}^{N} T_i^{p^2}} \times 100$$
(49)

En donde T_s^i corresponde a la solución actual del sistema, mientras que T_p^i representa la solución obtenida en la iteración previa. Se debe señalar que el carácter local de las funciones de forma utilizadas en el MGLE permite el cálculo de la temperatura en cualquier parte del dominio, y no solo en las posiciones nodales. El cálculo de la temperatura en los puntos de cuadratura es indispensable, pues estas cantidades son requeridas en el cálculo de las propiedades físicas y de transporte en cada iteración, las cuales a su vez están involucradas en las integrales que se deben resolver en el MGLE.

Por otra parte, como criterio de convergencia para el esquema de Newton-Raphson empleado en la solución de la ecuación de cantidad de movimiento se consideró un error en la norma de energía de deformación del espesor sólido menor a 0,1%. El error en la norma de energía de deformación se define como (Belytschko et al., 1994):

$$\frac{Energia_{error}}{\simeq} \frac{\sqrt{\frac{1}{2} \int_{\Omega} \left(\varepsilon_{ij}^{e(s)} - \varepsilon_{ij}^{e(p)}\right) C_{ijkl} \left(\varepsilon_{kl}^{e(s)} - \varepsilon_{kl}^{e(p)}\right) d\Omega}}{\sqrt{\frac{1}{2} \int_{\Omega} \varepsilon_{ij}^{e(p)} C_{ijkl} \varepsilon_{kl}^{e(p)} d\Omega}}$$
(50)

En donde $\varepsilon_{ij}^{e(s)}$ corresponde a la deformación elástica en la solución actual del sistema, mientras que $\varepsilon_{ij}^{e(p)}$ representa la deformación elástica en la iteración previa. Una vez resuelto el balance de cantidad de movimiento en el espesor sólido, se estima la brecha de aire formada entre el molde y el metal solidificado, para calcular nuevamente el campo de temperaturas. El proceso se repite hasta que

las soluciones de los balances de energía interna y cantidad de movimiento se satisfagan mutuamente, lo que significa acoplar el problema en dos direcciones.

RESULTADOS

El problema acoplado de transferencia de calor y análisis de esfuerzos en el proceso de CC, ha sido resuelto empleando el MGLE, considerando las condiciones de proceso presentadas en la Tabla 1.

 Tabla 1. Parámetros de proceso empleados en el modelo de colada continua

Parámetro	Valor
Largo del Molde	90 cm
Velocidad de Colada	0,65 m/min
Radio de la Palanquilla	16 cm
Porcentaje de Carbono	0,14%
Temperatura de Colada	1813 K
Temperatura del Fluido Refrigerante	298 K
T. Solidus de los Polvos de Colada	1323 K
Espesor de las Paredes del Molde	0,6 K
Coef. Trans. Convección Fluido Refrigerante dentro del molde	1,4803 W/cm2K

Las distribuciones de temperaturas, fases y esfuerzos de Von Mises calculadas por medio de la formulación propuesta en este trabajo, se muestran en las Figuras 3-5. La Figura 3 muestra la disminución de la temperatura superficial del cilindro en la dirección de colada, además de ligeras fluctuaciones en la distribución de temperaturas, lo que corresponde a un comportamiento bastante similar a la dinámica de un proceso real. En este sentido, se evidencia la precisión del MGLE para cuantificar aspectos no lineales con precisión, debido a la robusta integración del cambio de las propiedades físicas y el flujo de calor superficial con la temperatura. Por lo tanto, en este punto se puede observar que la precisión de la solución MGLE en la integración de los aspectos no lineales, permite la evaluación detallada de la variación de las propiedades físicas y de transporte a lo largo del molde, lo que resulta en un crecimiento del espesor solidificado no uniforme durante el proceso.

(Álvarez, Puchi y Bencomo, 2015; Domitner Wu, Ludwig, 2014) Adicionalmente, la Figura 4 demuestra la idoneidad del MGLE para determinar la distribución de fases durante el proceso de CC, permitiendo inclusive describir el comportamiento escalonado de las fracciones en peso de las fases, debido a la transformación peritéctica. (Álvarez, Puchi y Bencomo, 2015; Domitner Wu, Ludwig, 2014)



Por otra parte, la distribución de esfuerzos de Von Mises mostrada en la Figura 5, exhibe valores mayores de las solicitaciones mecánicas, en las cercanías de la superficie enfriada, debido a los mayores gradientes térmicos, implicando esto un aporte importante de la contracción térmica al estado de esfuerzos. Además, en las cercanías de la interfase sólido-líquido se evidencia una relajación repentina en el estado de esfuerzos, luego de la transformación ferrita⁸austenita^γ, la cual ha sido identificada con precisión dada la formulación débil global del MGLE, lo que permite que las funciones de forma sean creadas en cada punto de interés y no en subdominios discretos, como sucede en métodos tradicionales como el MEF. En este sentido, en el MGLE las funciones de forma y sus derivadas son continuas en todo el dominio, lo que permite lograr una integración robusta de la deformación inelástica en la dirección de colada, así como también tratar con discontinuidades que presentarían una gran problemática en el MEF, especialmente cuando las isotermas solidus y liquidus no coinciden con los bordes de los elementos (Fachinotti y Cardona, 2007; Li y Thomas, 2004). En procesos de colada continua, cuando los modelos termo-mecánicos están restringidos al material solidificado, tal como el propuesto en este trabajo, una discretización en elementos finitos basada solo en elementos rectangulares impediría un mallado preciso del dominio sólido en las adyacencias de la interfase sólido-líquido (Fachinotti et al., 2007; Álvarez et al., 2016). Existen también modelos en elementos finitos formulados bajo enfoques de un solo dominio incluyendo las regiones sólida, pastosa y líquida, en los cuales la presión ferrostática no se aplica exactamente en la interfase, pero en cambio en nodos justo debajo de la temperatura solidus, dado que la isoterma de transformación no coincide con los bordes de los elementos (Li y Thomas, 2004). Adicionalmente, para garantizar la precisión de la integración a lo largo de las travectorias axiales, la cual ha sido ya explicada en la sección de ecuaciones gobernantes, es necesario identificar el elemento que contiene la partícula que se está estudiando junto con una técnica de post-procesamiento con el objeto de superar las discontinuidades en el cálculo de los esfuerzos en las fronteras de los elementos. Por otra parte, en la formulación débil-global del MGLE, el dominio y sus fronteras son representados (no discretizados) por un conjunto de nodos, y las variables de campo no son aproximadas con funciones

de forma a trozos en un conjunto de subdominios, dado que no hay ninguna discretización geométrica en el dominio del problema (Belytscho, 1994; Liu, 2003). Por lo tanto, las funciones de forma son creadas utilizando nodos en un dominio local móvil, lo que mejora la precisión en la representación de fronteras curvas aún cuando se utilice una base de polinomios lineales. Además, las funciones de forma son construidas para cada posición de interés dentro del dominio en considerando los nodos involucrados en el dominio local móvil, a diferencia del MEF, cuyas funciones de forma son definidas para cada elemento. Esta formulación en elementos da lugar al cálculo discontinuo de los esfuerzos y a dificultades para tratar discontinuidades relacionadas con los cambios de fase, las cuales generalmente no coinciden con las fronteras de los elementos. Por este motivo, las características del MGLE son especialmente útiles para superar las desventajas ya mencionadas inherentes a los cambios de fase, la aproximación del domino sólido cerca de la interfaz sólidolíquido y la capacidad de lograr una integración robusta en las trayectorias axiales de las partículas en modelos termomecánicos desarrollados en base al MEF.



Figura 4. Distribución de fases. (a) Fase gamma; (b) fase delta; (c) fase líquida

Es importante señalar que la implementación del MGLE ha sido ya validada en comunicaciones previas presentadas por los autores de este trabajo (Álvarez, Puchi, Bencomo, 2015; Álvarez, Puchi y Bencomo, 2016), frente a medidas experimentales de espesor solidificado a lo largo de la dirección de colada, y frente a modelos termo-mecánicos acoplados en una dirección.

Estos últimos, se basan en estudios orientados a preescribir el flujo de calor en la superficie de la palanquilla, con base en análisis inversos y soluciones semi-analíticas, previos a un análisis termo-mecánico.





Por otra parte, este trabajo de investigación está orientado a obtener una mejor predicción en el desempeño del proceso de CC por medio de un enfoque más apropiado con un acoplamiento en dos direcciones, considerando el cálculo de la brecha de aire en el problema mecánico.

ANÁLISIS

La distribución de deformaciones inelásticas y las componentes de los esfuerzos normales (axial y circunferencial) calculadas sobre el espesor solidificado a la salida del molde, son mostradas en la Figura 6. La figura exhibe el patrón clásico de esfuerzos con compresión cerca de la superficie enfriada y tensión justo un poco dentro del espesor solidificado. Además, las componentes de esfuerzo exhiben los valores compresivos más elevados cerca de la superficie enfriada, como consecuencia de las mayores tasas de enfriamiento, lo cual da lugar a una importante contracción térmica.

Plastica: Elastica Plastica Deformación Inelástica Efectiva 0 x 10⁻³ 100 200 15 300 ongitud del Molde 10 400 500 600 700 800 900 10 20 30 Π 5 ¦ 15 25Distancia a la superficie enfriada (mm) Componentes normales de esfuerzo a través del espesor solidificado 6 4 2 Esfuerzo (Mpa) 0 -2 Circunferencial Axial -6 -8 5 | 10 15 20 25 30 'n Distancia de la superficie enfriada (mm)

Figura 6. Distribución de esfuerzos a través de las distintas zonas reológicas dentro el espesor solidificado

La zona compresiva presenta un comportamiento viscoplástico, mientras que la transición al estado de esfuerzos en tensión tiene lugar a través de una zona elástica o casi libre de deformación plástica, seguida por una relajación viscoplástica al aproximarse al frente de solidificación. El espesor solidificado inicialmente experimenta deformación plástica, y subsecuentemente se deforma elásticamente a medida que la temperatura decrece. Se puede observar también que un incremento importante de la deformación viscoplástica ocurre en áreas cercanas al frente de solidificación, para relajar parte de los esfuerzos debido a un reemplazo de deformaciones elásticas con deformaciones inelásticas, como consecuencia de las más elevadas temperaturas. Esto también se debe a la presencia de la ferrita^{δ} la cual es mucho más débil que la austenita^{γ} (Li y Thomas, 2004). Por lo tanto, la transición austenita^{γ}ferrita⁸ induce cambios importantes en la evolución del estado de esfuerzos a través del espesor solidificado. Esta transformación en estado sólido genera una notable contracción volumétrica, demostrando la importancia de la transformación austenita⁷- ferrita⁸, considerando principalmente la diferencia entre sus estructuras cristalinas, tal como se muestra en la Figura 7.



Figura 7. Efecto de la contracción térmica durante la transformación ferrita⁸- austenita⁹



Figura 8. : Convergencia entre la brecha de aire y el flujo de calor superficial

La capacidad del MGLE para cuantificar el efecto del comportamiento mecánico sobre la transferencia de calor, se demuestra en las Figuras 8 (a)-(b). Las figuras ilustran el efecto significativo de la brecha de aire en el flujo de calor superficial, lo cual da lugar al requerimiento del enfoque acoplado en ambas direcciones. Por lo tanto, los problemas termo-mecánico y de transferencia de calor han sido resueltos hasta alcanzar convergencia entre la brecha de aire y el flujo de calor en la interfase molde-palanquilla. Este efecto importante de la brecha de aire sobre el flujo de calor superficial, está asociado principalmente a la baja conductividad térmica del aire, en relación con los demás mecanismos de transporte que contribuyen a la condición de enfriamiento de Robin (ver Ec. 38). En este sentido, se puede observar como en el modelo acoplado solo en una dirección donde se prescribe el calor en base al modelo semi-analítico de Yamauchi et al., 2002, se subestima el flujo de calor superficial, así como también el espesor de la brecha de aire en la interfaz molde-metal, comprobando así la importancia de formular un problema acoplado en dos direcciones, pues permite cuantificar de manera más adecuada el efecto que tiene la deformación del espesor solidificado sobre el balance de energía interna debido a su notable influencia en el flujo de calor superficial. La comparación entre ambos resultados demuestra la idoneidad del MGLE para lograr un acoplamiento en dos direcciones entre las ec. (1) y (3). Adicionalmente, la notable diferencia entre el modelo acoplado en una dirección (Curva de Yamauchi en las Figuras 8 (a)-(b)) y el acoplado en dos direcciones demuestra que el flujo de calor no puede ser cuantificado correctamente cuando solo es impuesto con fórmulas aproximadas antes de resolver el problema termomecánico.

.

CONCLUSIONES

Un nuevo enfoque para resolver el problema termo-mecánico presente en los procesos de CC ha sido desarrollado, con el empleo del MGLE. Este estudio ha probado la viabilidad de una solución en base al MGLE bajo una descripción mixta Euleriana-Lagrangiana, la cual hasta ahora había sido implementada por medio de métodos basados en malla tales como el MEF. La presente investigación ha demostrado que el MGLE puede ser empleado exitosamente en el análisis de la distribución de esfuerzos y variables no conservativas durante el proceso de CC, por medio de una solución que acopla mutuamente a los balances de energía interna y cantidad lineal de movimiento. Esto ha sido posible debido al carácter no interpolador de las funciones de forma, la formulación débil global y la ausencia de discretización en el método empleado, lo que permite superar problemas asociados a las transformaciones de fase y representación del dominio sólido cerca de la interfaz sólido-líquido, considerando que el espesor solidificado es solo representado por un conjunto de nodos y que en el MGLE las funciones de forma y sus derivadas son continuas en todo el dominio. Este último aspecto ha sido de suma importancia para la integración de los incrementos de deformación inelástica, los cuales son función de la componente desviadora del tensor de esfuerzos, tal como se ha explicado en los incisos de esta comunicación. Adicionalmente, la relación entre la brecha de aire predicha con el modelo termo-mecánico y el flujo de calor impuesto en el balance de energía interna ha sido evidenciada durante el proceso de solución iterativa de estas cantidades, lo que justifica el empleo de un esquema acoplado en dos direcciones, cuando no se dispone de una expresión semi-analítica o basada en un modelo inverso,

para preestablecer el flujo de calor superficial en el balance de energía interna.

REFERENCIAS

- ÁLVAREZ HOSTOS J. C., PUCHI CABRERA E. S., BENCOMO A. D. (2015). Element Free Galerkin Formulation by Moving Least Squares for Internal Energy Balance in a Continuous Casting Process. Steel Research International, 86, pp. 1403-1418.
- ÁLVAREZ HOSTOS J. C., PUCHI CABRERA E. S., BENCOMO A. D. (2016). Stress Analysis of a Continuous Casting Process, on the Basis of the Element-Free Galerkin Formulation. Steel Research International, 87, srin.201600019.
- ALIZADEH M., JAHROMI S.A.J., NASIHATKON S.B. (2010) Applying Finite Point Method in Solidification Modeling during Continuous Casting Process, ISIJ International, 50, pp. 47-56.
- BARCELLOS V. K., FERREIRA C. R. F., SANTOS C. F., SPIM J. A. (2010). Analysis of Metal Mold Heat Transfer Coefficients During Continuous Casting of Steel. Ironmaking and Steelmaking, 37, pp. 47-56.
- BORDAS S., NGUYEN V. P., RABCZUK T., DUFLOT M. (2008). Meshless methods: A Review and Computer Implementation Aspects. Mathematics and Computers in Simulation, 79, pp. 763-813.
- BELYTSCHKO T., LU Y. Y., GU L. (1994). Element-Free Galerkin Methods. International Journal for Numerical Methods in Engineering, 37, pp. 229-256.
- DE SOUZA NETO E. A., PERIC D., OWEN D. R. J. (2008). Computational Methods for Plasticity, Theory and Applications, Wiley.
- DOMITNER F., WU M., LUDWIG A. (2014). Numerical Study about the Influence of Small Casting Speed Variations on the Metallurgical Length in Continuous Casting of Steel Slabs, Computational Methods for Plasticity, Steel Research International, 85.
- DOU Z., LIU Q., WANG B., ZHANG X., ZHANG J., HU Z. (2011). Evolution of Control Models of Secondary Cooling in Continuous Casting Process of Steel. Steel Research International, 82, pp. 1220-1227.

- FACHINOTTI V., CARDONA A. (2007). A Fixedmesh Eulerian-Lagrangian Approach for Stress Analysis in Continuous Casing. International Journal for Numerical Methods in Engineering, 70, pp. 728-755.
 - HANOGLU U., ISLAM SIRAJ-UL, SARLER BOZIDAR. (2011). Thermo-Mechanical Analysis of Hot Shape Rolling of Steel by a Meshless Method. Procedia Engineering, 10, pp. 3173-3178.
 - LI C., THOMAS B. (2004). Thermomechanical Finite-Element Model of Shell Behavior in Continuous Casting of Steel. Metallurgical and Materials Transactions B, 35B, pp. 1151-1172.
 - LIU G. R., MESHFREE METHODS, Moving Beyond the Finite Element Method, CRC Press LLC, 2003
 - RAO B., RAHMAN S. (2000). An Efficient Meshless Method for Fracture Analysis of Cracks, Computational Mechanics, 26, pp. 398-408.
 - SARLER B. (2015). Local Radial Basis Function Collocation Method for Linear Thermoelasticity in Two Dimensions, International Journal of Numerical Methods for Heat Fluid Flow, 25, pp. 1488-1510.
 - SONG J., CAI F., PIAO F., ZHU M. (2014). Heat Transfer and Deformation Behavior of Shell Solidification in Wide and Thick Slab Continuous Casting Mold. Journal of Iron and Steel Research, 21, pp. 1-9.
 - VERTNIK R., SÄRLER B. (2009). Simulation of Continuous Casting of Steel by a Meshless Technique. International Journal of Cast Metals Research, 22, pp. 311-313.
- XIA Y. J., FAN D. D., WANG S. J., WANG H. C., LI J. (2014). Simulation of Heat Transfer and Strain Behavior in Bloom Casting Mold. Ironmaking and Steelmaking, 41, pp. 166-172.
- YAMAUCHI A. EMI T., SEETHARAMAN SESHADRI, A. (2002). Mathemathical Model for Prediction of Thickness of Mould Flux Film in Continuous Casting Mould. ISIJ International, 42, pp. 1084-1093.
- XUE-HONG W., WEN-QUAN T. (2008). Meshless Method Based on the Local Weak-forms for Steady-state Heat Conduction Problems.

International Journal of Heat and Mass Transfer, 51, pp. 3103-3112.

- ZHANG L., SHEN H., RONG Y., HUANG T. (2007). Numerical Simulation on Solidification and Thermal Stress of Continuous Casting Billet in Mold, Based on Meshless Methods. Materials Science and Engineering A, 466, pp. 71-78.
- ZHANG D., CHEN D., WANG S., LONG M. (2011). Compensation Control Model of Superheat and Cooling Water Temperature for Secondary Cooling of Continuous Casting. Steel Research International, 82, pp. 166-172.