

## **ANÁLISIS TERMOMECÁNICO DE PROCESOS DE CAMBIO DE FASE METALES USANDO ELEMENTOS FINITOS TETRAÉDRICOS LINEALES**

**Víctor D. Fachinotti, Andrés A. Anca y Alberto Cardona**

*Centro Internacional de Métodos Computacionales en Ingeniería (CIMEC-INTEC) Universidad  
Nacional del Litoral / CONICET, Predio CCT CONICET Santa Fe, Paraje El Pozo, Santa Fe,  
Argentina, <http://www.cimec.org.ar>*

**Palabras Clave:** Cambio de fase, elementos finitos, tetraedros lineales.

**Resumen.** Satisfechos con la precisión y robustez de los elementos finitos tetraédricos lineales (P1) con integración discontinua para el análisis térmico de problemas que involucren con cambio de fase en procesos industriales, nos proponemos usar elementos de igual tipo para el análisis mecánico de tales problemas.

A altas temperaturas, la deformación de los metales es mayormente inelástica e isocórica, lo que induce las dificultades típicas de la modelización numérica de materiales incompresibles, como el bien conocido bloqueo que presentan los elementos finitos más sencillos entre los que se cuentan el tetraedro P1.

Los fenómenos térmicos y mecánicos están fuertemente acoplados en procesos como la colada y la soldadura, a los que apunta principalmente este trabajo. Ello se resuelve en una sucesión de pasos de cálculo, cada uno consistente de un análisis térmico seguido de un mecánico. Buscamos aquí usar las mismas grillas de nodos para los análisis térmico y mecánico a fin de evitar la proyección de resultados entre mallas diferentes, que tornaría la solución excesivamente difusiva al cabo de varios pasos.

Habiendo probado en el pasado combinar elementos finitos térmicos (P1) con diferentes elementos mecánicos (Q1/P0, P2/P0), pero que compartieran los mismos nodos, nos proponemos ahora buscar elementos mecánicos tetraédricos lineales apropiados. Con ese fin, elegimos para este trabajo el elemento  $P1^+/P1$ , tetraedro lineal en tensiones medias y desplazamientos, éstos últimos enriquecidos por una función de tipo “burbuja”. Los grados de libertad “burbuja” desaparecen del sistema global por condensación estática, reduciendo el costo computacional.

## 1. INTRODUCCIÓN

Habiendo comprobado la precisión y robustez de los elementos finitos tetraédricos lineales (P1) con integración discontinua para el análisis térmico de problemas que involucren metales sujetos a cambio de fase en procesos industriales como la colada y la soldadura (Fachinotti et al., 2000; Fachinotti, 2001; Anca, 2008) nos proponemos encontrar elementos de igual tipo para el análisis mecánico de tales problemas.

A altas temperaturas, la deformación de los metales es mayormente plástica o visco-plástica, y es ampliamente aceptado que esta deformación es isocórica (Fachinotti y Cardona, 2003). Ello acarrea los problemas típicos asociados a la restricción de incompresibilidad, como el bien conocido bloqueo que presentan los elementos finitos más sencillos entre los que se cuentan el tetraedro P1.

En procesos termomecánicos como la colada y la soldadura, los fenómenos térmicos y mecánicos están fuertemente acoplados. Ello nos obliga a realizar una sucesión de pasos de cálculo, cada uno consistente de un análisis térmico seguido de un mecánico, hasta obtener la solución final. Esto también impone la necesidad de usar idénticas grillas de nodos para los análisis térmico y mecánico a fin de evitar la proyección de resultados entre mallas diferentes, que tornaría la solución excesivamente difusiva al cabo de varios pasos.

Para respetar esa premisa, recurrimos en el pasado a varias alternativas con relativo éxito. Primero usamos elementos finitos triangulares mixtos P2/P0, o sea, con interpolación cuadrática de desplazamientos y constante de presiones (Fachinotti, 2001; Fachinotti y Cardona, 2007). Cada elemento mecánico P2/P0 da lugar a 4 elementos térmicos P1. Esto conducía a elementos mecánicos muy gruesos en la interface sólido-líquido, incapaces de captar correctamente la fuerte variación de comportamiento a uno y otro lado de la interface.

Luego recurrimos a elementos hexaédricos mixtos Q1/P0, es decir con interpolación trilineal de desplazamientos y constante de presiones (Anca, 2008). Los hexaedros trilineales (Q1) se revelaron muy poco robustos para resolver problemas térmicos con cambio de fase: era frecuentemente imposible converger a la solución de la ecuación del calor, fuertemente no lineal en presencia de cambio de fase. Por ello, cada hexaedro Q1/P0 del problema mecánico debía ser dividido en 6 tetraedros P1 para el análisis térmico. De todos modos, este enfoque se vio perjudicado por la menor robustez de los generadores de mallas de hexaedros frente a los de tetraedros.

Las razones antes mencionadas nos condujeron a los elementos tetraédricos mixtos P1/P1 de igual orden de interpolación (lineal) tanto para los desplazamientos como para las presiones. Estos elementos necesitan incluir un término de estabilización en presencia de la restricción de incompresibilidad. Con ese fin, elegimos para este trabajo el elemento P1<sup>+</sup>/P1 (Arnold et al., 1984), donde el término de estabilización surge de enriquecer la interpolación de desplazamientos con una función de tipo burbuja. Los grados de libertad asociados a la función burbuja desaparecen del sistema global por condensación estática, lo que reduce el costo computacional.

Mostramos finalmente resultados que validan la implementación del presente modelo.

## 2. PROBLEMA TÉRMICO

La temperatura  $T = T(x, y, z, t)$  en todo punto  $(x, y, z)$  del dominio de análisis  $\Omega$  al instante  $t$  está gobernada por la ecuación de conducción de calor

$$\frac{\partial H}{\partial t} - \nabla \cdot (\kappa \nabla T) = \bar{q} \quad (1)$$

donde  $H$  es la entalpía,  $\mathbf{k}$  el tensor de conductividad térmica y  $\bar{q}$  la fuente de calor prescrita, proveniente de la antorcha en problemas de soldadura.

El problema térmico se completa con la condición inicial:

$$T(x, y, z, 0) = T_0(x, y, z) \quad \forall (x, y, z) \in \Omega \quad (2)$$

y las condiciones sobre la frontera  $\Gamma = \Gamma_T \cup \Gamma_q \cup \Gamma_{cr}$  ( $\Gamma_T$ ,  $\Gamma_q$  y  $\Gamma_{cr}$  no se solapan):

$$T(x, y, z, t) = \bar{T}(x, y, z, t) \quad \forall (x, y, z) \in \Gamma_T, t > 0 \quad (3)$$

$$-\mathbf{k} \text{grad } T \cdot \mathbf{n} = \bar{f} \quad \forall (x, y, z) \in \Gamma_q, t > 0 \quad (4)$$

$$-\mathbf{k} \text{grad } T \cdot \mathbf{n} = h(T - T_{cr}) \quad \forall (x, y, z) \in \Gamma_{cr}, t > 0 \quad (5)$$

donde  $\bar{T}$  y  $\bar{f}$  son valores prescritos de la temperatura y el flujo de calor,  $\mathbf{n}$  es el versor normal exterior a  $\Gamma$ ,  $h$  es el coeficiente de convección/radiación (en general, dependiente de  $T$ ) y  $T_{cr}$  designa ya sea la temperatura del entorno o la del cuerpo radiante.

Para obtener una formulación basada únicamente en  $T$ , introducimos la función de entalpía definida como

$$H(T) = \int_0^T \rho c_p(\tau) d\tau + \rho L f_l(T) \quad (6)$$

donde  $\rho c_p$  es el calor específico,  $L$  el calor latente de solidificación y  $f_l$  la fracción volumétrica de líquido, la que asumiremos que varía linealmente entre las temperaturas de solidus  $T_{sol}$  y de liquidus  $T_{liq}$ , o sea:

$$f_l = \begin{cases} 0 & \text{para } T < T_{sol} \\ \frac{T - T_{sol}}{T_{liq} - T_{sol}} & \text{para } T_{sol} \leq T \leq T_{liq} \\ 1 & \text{para } T > T_{liq} \end{cases} \quad (7)$$

En caso de solidificación isotérmica, propia de metales puros,  $T_{sol} = T_{liq}$ , y  $f_l$  toma la forma de la función escalón de Heaviside.

Despreciamos en este trabajo la contribución de los cambios de fase sólido-sólido a  $H$ , puesto que el calor latente de estas transformaciones es usualmente despreciable frente al calor latente de solidificación.

La solución numérica de la ecuación de calor (1) requiere su discretización. La discretización espacial se consigue usando elementos finitos tetraédricos lineales con integración discontinua de los términos de calor latente, permitiendo una representación precisa de la liberación/absorción de calor latente durante la solidificación/fusión. Para la integración temporal, recurrimos al método retro-Euler, implícito e incondicionalmente estable.

Toda la formulación que desarrollamos para la solución de problemas transitorios de cambio de fase ha sido ampliamente descrita en trabajos previos (Fachinotti et al. (1999); Fachinotti (2001); Anca (2008)), a los que remitimos por mayores detalles.

### 3. PROBLEMA MECÁNICO

A diferencia del problema térmico que se plantea sobre un dominio de análisis  $\Omega$  que incluye las tres fases en que puede encontrarse el material, esto es, sólida, líquida y pastosa, el análisis mecánico se restringirá al dominio  $\Omega^s$  donde el material exhibe resistencia mecánica. Se considera tal el material cuya temperatura sea inferior a la denominada ZST (Zero-Strength

Temperature), próxima a la temperatura de solidus (Yamanaka et al., 1995; Nakagawa et al., 1995). Cabe recordar que este trabajo está motivado en la utilización de la misma malla de elementos finitos para los análisis térmico y mecánico, por lo que plantearémos será planteado a priori sobre el dominio global  $\Omega$ . En la sección 4.4, explicaremos el tratamiento de los elementos mecánicos cuya temperatura exceda ZST.

El problema mecánico sobre el dominio  $\Omega$  está gobernado por las ecuaciones de equilibrio

$$\nabla \cdot \boldsymbol{\sigma} + \mathbf{f} = \mathbf{0} \quad \text{en } \Omega \quad (8)$$

donde  $\boldsymbol{\sigma}$  es el tensor de tensiones de Cauchy y  $\mathbf{f}$  el vector de fuerzas externas por unidad de volumen.

Sobre la frontera  $\Gamma$ , ahora dividida en dos porciones  $\Gamma_u$  y  $\Gamma_t$  no solapadas, rigen las siguientes condiciones de borde:

$$\mathbf{u} = \mathbf{0} \quad \text{sobre } \Gamma_u \quad (9)$$

$$\boldsymbol{\sigma} \mathbf{n} = \mathbf{t} \quad \text{sobre } \Gamma_t \quad (10)$$

donde  $\mathbf{u}$  es el vector de desplazamientos, supuesto nulo en la superficie  $\Gamma_u$ ,  $\mathbf{t}$  el vector de tracciones aplicadas sobre la superficie  $\Gamma_t$ .

### 3.1. Comportamiento del material

Supongamos que las deformaciones que se producen en  $\Omega$  son pequeñas, hipótesis muy difundida en el estudio de soldadura y de colada. En este caso, el tensor de deformación se define como  $\boldsymbol{\varepsilon} = \nabla^s \mathbf{u}$ , y puede expresarse como la suma de una componente elástica  $\boldsymbol{\varepsilon}^e$  y una inelástica  $\boldsymbol{\varepsilon}^i$ , o sea:

$$\boldsymbol{\varepsilon} = \boldsymbol{\varepsilon}^e + \boldsymbol{\varepsilon}^i. \quad (11)$$

Por su parte, descompongamos la tensión  $\boldsymbol{\sigma}$  como

$$\boldsymbol{\sigma} = \mathbf{s} + p\mathbf{l} \quad (12)$$

donde  $\mathbf{s} = \text{dev} \boldsymbol{\sigma}$ ,  $p = \text{tr} \boldsymbol{\sigma}$  y  $\mathbf{l}$  es el tensor identidad de 2º orden.

Además, asumiendo que el material es isótropo y linealmente elástico,  $\mathbf{s}$  y  $p$  están dadas por:

$$\mathbf{s} = 2\mu \text{dev}(\boldsymbol{\varepsilon}^e - \boldsymbol{\varepsilon}^0) \quad (13)$$

$$p = \kappa \text{tr}(\boldsymbol{\varepsilon}^e - \boldsymbol{\varepsilon}^0) \quad (14)$$

donde  $\mu$  es el módulo de corte,  $\kappa$  es el módulo de compresibilidad volumétrica y  $\boldsymbol{\varepsilon}^0$  es la deformación inicial, que puede expresarse como

$$\boldsymbol{\varepsilon}^0 = \boldsymbol{\varepsilon}^t + \boldsymbol{\varepsilon}^s \quad (15)$$

siendo  $\boldsymbol{\varepsilon}^t$  la deformación térmica y  $\boldsymbol{\varepsilon}^s$  la deformación del material justo antes de desarrollar resistencia.

Si adoptamos una regla de flujo inelástico tipo  $J_2$ , la más usada para representar el comportamiento de metales a altas temperaturas (Fachinotti, 2001), la parte inelástica de la deformación resulta isocórica, esto es  $\text{tr} \boldsymbol{\varepsilon}^i = 0$ , por lo que

$$\text{tr} \boldsymbol{\varepsilon}^e = \text{tr} \boldsymbol{\varepsilon} = \nabla \cdot \mathbf{u} \quad (16)$$

#### 4. FORMULACIÓN MIXTA EN ELEMENTOS FINITOS

Planteado en forma variacional mixta, el problema mecánico consiste en hallar el campo de desplazamientos  $\mathbf{u} \in \mathcal{V}$  y el campo de tensiones medias  $p \in \mathcal{Q}$  tal que

$$\int_{\Omega} \mathbf{s} \cdot \nabla^s \delta \mathbf{u} \, dV + \int_{\Omega} \nabla p \cdot \delta \mathbf{u} \, dV + \int_{\Omega} \mathbf{f} \cdot \delta \mathbf{u} \, dV + \int_{\Gamma_t} \mathbf{t} \cdot \delta \mathbf{u} \, dS = 0 \quad (17)$$

$$\int_{\Omega} (\nabla \cdot \mathbf{u}) \delta p \, dV - \int_{\Omega} \frac{1}{\kappa} p \delta p \, dV = \int_{\Omega} \text{tr} \, \boldsymbol{\varepsilon}^0 \delta p \, dV \quad (18)$$

para todas las variaciones admisibles  $\delta \mathbf{u} \in \mathcal{V}$  y  $\delta p \in \mathcal{Q}$ . Nótese que las ecuaciones (17) y (18) constituyen la forma débil de la ecuación de equilibrio (8) y de la ecuación constitutiva (14) para la tensión media, respectivamente.

Supongamos el dominio  $\Omega$  dividido en  $n^e$  elementos finitos tetraédricos lineales  $\Omega^e$ . Comencemos por reemplazar el espacio de prueba  $\mathcal{Q}$  para las tensiones medias por el espacio lineal clásico

$$\mathcal{Q}^h = \{q/q \in C^0(\Omega) \text{ y } q|_{\Omega^e} \in P_1(\Omega^e), \, e = 1, \dots, n^e\} \quad (19)$$

Luego, aproximemos las funciones  $\mathbf{v} \in \mathcal{V}$  como:

$$\mathbf{v} = \mathbf{v}^l + \mathbf{v}^b \quad (20)$$

donde  $\mathbf{v}^l$  es la función lineal clásica, perteneciente al espacio:

$$\mathcal{V}^h = \{\mathbf{v}/v_i \in \mathcal{Q}^h \text{ y } v_i|_{\Gamma} = 0, \, i = 1, 2, 3\} \quad (21)$$

y  $\mathbf{v}^b$  es una función “burbuja”. Siguiendo a Arnold et al. (1984), adoptamos  $\mathbf{v}^b$  del espacio lineal por trozos

$$\mathcal{B}^h = \{\mathbf{v}/v_i \in C^0(\Omega), \, v_i|_{\Omega_j^e} \in P_1(\Omega_j^e) \text{ y } v_i|_{\Gamma^e} = 0, \, i = 1, 2, 3, \, j = 1, 2, 3, 4, \, \forall e\} \quad (22)$$

donde  $\Gamma^e$  denota la frontera de  $\Omega^e$  y  $\Omega_j^e$  es el subtetraedro que tiene por base la cara de  $\Omega^e$  opuesta al nodo  $j$  y el vértice restante está situado en el centro de  $\Omega^e$ .

**Nota.** Denominaremos  $P1^+/P1$  a este elemento finito de geometría simplex (o sea, tetraédrico en 3D), con interpolación lineal de desplazamientos y presiones, más una burbuja lineal por trozos enriqueciendo la aproximación de los desplazamientos.

Introduciendo estas aproximaciones, el problema definido por las ecuaciones (17) y (18) deviene discreto. Se trata ahora de encontrar  $(\mathbf{u}^l, \mathbf{u}^b, p) \in \mathcal{V}^h \times \mathcal{B}^h \times \mathcal{Q}^h$  tal que

$$\int_{\Omega} \mathbf{s} \cdot \nabla^s \delta \mathbf{u}^l \, dV + \int_{\Omega} p \nabla \cdot \delta \mathbf{u}^l \, dV = \int_{\Omega} \mathbf{f} \cdot \delta \mathbf{u}^l \, dV + \int_{\Gamma_t} \mathbf{t} \cdot \delta \mathbf{u}^l \, dS \quad (23)$$

$$\int_{\Omega} \mathbf{s} \cdot \nabla^s \delta \mathbf{u}^b \, dV + \int_{\Omega} p \nabla \cdot \delta \mathbf{u}^b \, dV = \int_{\Omega} \mathbf{f} \cdot \delta \mathbf{u}^b \, dV \quad (24)$$

$$\int_{\Omega} \nabla \cdot (\mathbf{u}^l + \mathbf{u}^b) \delta p \, dV - \int_{\Omega} \frac{1}{\kappa} p \delta p \, dV = \int_{\Omega} \text{tr} \, \boldsymbol{\varepsilon}^0 \delta p \, dV \quad (25)$$

$$\forall (\delta \mathbf{u}^l, \delta \mathbf{u}^b, \delta p) \in \mathcal{V}^h \times \mathcal{B}^h \times \mathcal{Q}^h$$

El desviador de tensión, función de  $\mathbf{u} = \mathbf{u}^l + \mathbf{u}^b$ , puede calcularse como

$$\mathbf{s} = 2\mu \text{dev} [\boldsymbol{\varepsilon}(\mathbf{u}^l + \mathbf{u}^b) - \boldsymbol{\varepsilon}^i(\mathbf{u}^l + \mathbf{u}^b) - \boldsymbol{\varepsilon}^0] \quad (26)$$

La deformación total  $\boldsymbol{\varepsilon}(\mathbf{u})$  es lineal en  $\mathbf{u}$ , de modo que

$$\boldsymbol{\varepsilon}(\mathbf{u}^l + \mathbf{u}^b) = \boldsymbol{\varepsilon}(\mathbf{u}^l) + \boldsymbol{\varepsilon}(\mathbf{u}^b) \quad (27)$$

Aquí, al igual que en numerosos trabajos previos (Jaouen, 1998; Cervera et al., 2003; Costes, 2004; Chiumenti et al., 2004), consideraremos  $\mathbf{u}^b$  suficientemente pequeño en comparación con  $\mathbf{u}^l$  como para despreciar su contribución a la deformación inelástica, o sea

$$\boldsymbol{\varepsilon}^i(\mathbf{u}^l + \mathbf{u}^b) \approx \boldsymbol{\varepsilon}^i(\mathbf{u}^l) \quad (28)$$

Ahora podemos descomponer  $\mathbf{s}$  en un término  $\mathbf{s}^l$  dependiente únicamente de  $\mathbf{u}^l$  y un término  $\mathbf{s}^b$  dependiente únicamente de (y lineal en)  $\mathbf{u}^b$ :

$$\mathbf{s} = \underbrace{2\mu \text{dev} [\boldsymbol{\varepsilon}(\mathbf{u}^l) - \boldsymbol{\varepsilon}^i(\mathbf{u}^l)]}_{\mathbf{s}^l} + \underbrace{2\mu \text{dev} [\boldsymbol{\varepsilon}(\mathbf{u}^b)]}_{\mathbf{s}^b} \quad (29)$$

Dado que la función burbuja se anula en la frontera  $\Gamma^e$  del elemento  $\Omega^e$ , usando el teorema de Green vemos que:

$$\int_{\Omega^e} \nabla \mathbf{u}^b \, dV = \mathbf{0} \quad \forall \mathbf{u}^b \in \mathcal{B}^h \quad (30)$$

de donde

$$\int_{\Omega^e} \mathbf{s}^l \cdot \nabla^s \delta \mathbf{u}^b \, dV = \int_{\Omega^e} \mathbf{s}^b \cdot \nabla^s \delta \mathbf{u}^l \, dV = 0 \quad (31)$$

Expresemos las funciones  $\mathbf{u}^l$ ,  $\mathbf{u}^b$  y  $p$  como combinaciones lineales de funciones de forma:

$$\mathbf{u}^l = N_i \mathbf{U}_i = \begin{bmatrix} N_1 & 0 & 0 & N_2 & 0 & 0 & \dots \\ 0 & N_1 & 0 & 0 & N_2 & 0 & \dots \\ 0 & 0 & N_1 & 0 & 0 & N_2 & \dots \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \mathbf{U}_1 \\ \mathbf{U}_2 \\ \vdots \end{bmatrix} = \mathbf{N} \mathbf{U} \quad (32)$$

$$\mathbf{u}^b = N_i^b \mathbf{b}_i = \begin{bmatrix} N_1^b & 0 & 0 & N_2^b & 0 & 0 & \dots \\ 0 & N_1^b & 0 & 0 & N_2^b & 0 & \dots \\ 0 & 0 & N_1^b & 0 & 0 & N_2^b & \dots \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \mathbf{b}_1 \\ \mathbf{b}_2 \\ \vdots \end{bmatrix} = \mathbf{N}^b \mathbf{b} \quad (33)$$

$$p = N_i P_i = [N_1 \quad N_2 \quad \dots] \begin{bmatrix} P_1 \\ P_2 \\ \vdots \end{bmatrix} = \mathbf{N}_p \mathbf{P} \quad (34)$$

donde  $N_i$  es la función lineal por trozos asociada al nodo  $i$ , tal que  $N_i = 1$  en el nodo  $i$  y  $N_i = 0$  en todos los demás nodos,  $N_e^b$  es la función lineal por trozos cuyo soporte se restringe al elemento  $\Omega^e$ , tal que  $N_e^b = 1$  en el centro de  $\Omega^e$  y  $N_e^b = 0$  en  $\Gamma^e$  (frontera de  $\Omega^e$ ),  $\mathbf{U}_i$  es el desplazamiento (incógnita) del nodo  $i$ ,  $P_i$  es la tensión media (incógnita) del nodo  $i$ , y  $\mathbf{b}_e$  es

el valor de  $\mathbf{u}^b$  (incógnita) en el centro del elemento  $\Omega^e$ . Análogamente, podemos expresar las variaciones de las funciones de prueba como:

$$\delta \mathbf{u}^l = \mathbf{N} \delta \mathbf{U}, \quad \delta \mathbf{u}^b = \mathbf{N}_b \delta \mathbf{b}, \quad \delta p = \mathbf{N}_p \delta \mathbf{P} \quad (35)$$

Introduciendo las expresiones de las funciones de prueba dadas por las ecuaciones (32) a (34) así como sus variaciones expresadas por las ecuaciones (35), eliminando los términos dados por la ecuación (31), y teniendo en cuenta que las variaciones son arbitrarias, llegamos al siguiente sistema de ecuaciones algebraicas, en general no lineal, para las incógnitas  $\mathbf{U}$ ,  $\mathbf{b}$  y  $\mathbf{P}$ :

$$\mathbf{R}_u = \underbrace{\left( \int_{\Omega} \mathbf{B}^T \hat{\mathbf{s}}^l dV \right)}_{\mathbf{R}_{uu}} + \underbrace{\left( \int_{\Omega} \mathbf{B}^T \mathbf{l} \mathbf{N}_p dV \right)}_{\mathbf{K}_{up}} \mathbf{P} - \underbrace{\left( \int_{\Omega} \mathbf{N}^T \mathbf{f} dV + \int_{\Gamma_t} \mathbf{N}^T \mathbf{t} dS \right)}_{\mathbf{F}_u} = \mathbf{0} \quad (36)$$

$$\mathbf{R}_b = \underbrace{\left( \int_{\Omega} \mathbf{B}_b^T \mathbf{D} \mathbf{B}_b dV \right)}_{\mathbf{K}_{bb}} \mathbf{b} + \underbrace{\left( \int_{\Omega} \mathbf{B}_b^T \mathbf{l} \mathbf{N}_p dV \right)}_{\mathbf{K}_{bp}} \mathbf{P} - \underbrace{\int_{\Omega} \mathbf{N}_b^T \mathbf{f} dV}_{\mathbf{F}_b} = \mathbf{0} \quad (37)$$

$$\mathbf{R}_p = \underbrace{\left( \int_{\Omega} \mathbf{N}_p^T \mathbf{l}^T \mathbf{B} dV \right)}_{\mathbf{K}_{pu} = \mathbf{K}_{up}^T} \mathbf{U} + \underbrace{\left( \int_{\Omega} \mathbf{N}_p^T \mathbf{l}^T \mathbf{B}_b dV \right)}_{\mathbf{K}_{pb} = \mathbf{K}_{bp}^T} \mathbf{b} + \underbrace{\left( - \int_{\Omega} \frac{1}{\kappa} \mathbf{N}_p^T \mathbf{N}_p dV \right)}_{\mathbf{K}_{pp}} \mathbf{P} - \underbrace{\int_{\Omega} \mathbf{N}_p^T \text{tr} \boldsymbol{\varepsilon}^0 dV}_{\mathbf{F}_p} = \mathbf{0} \quad (38)$$

con  $\hat{\mathbf{s}}^l = [s_{xx}^l \ s_{yy}^l \ s_{zz}^l \ s_{xy}^l \ s_{yz}^l \ s_{zx}^l]^T$ ,  $\mathbf{l} = [1 \ 1 \ 1 \ 0 \ 0 \ 0]^T$ ,  $\mathbf{B} = \mathbf{S} \mathbf{N}$ ,  $\mathbf{B}_b = \mathbf{S} \mathbf{N}_b$ ,

$$\mathbf{S} = \begin{bmatrix} \frac{\partial}{\partial x} & 0 & 0 \\ 0 & \frac{\partial}{\partial y} & 0 \\ 0 & 0 & \frac{\partial}{\partial z} \\ \frac{\partial}{\partial y} & \frac{\partial}{\partial x} & 0 \\ 0 & \frac{\partial}{\partial z} & \frac{\partial}{\partial y} \\ \frac{\partial}{\partial z} & 0 & \frac{\partial}{\partial x} \end{bmatrix}, \quad \mathbf{D} = \begin{bmatrix} \frac{2}{3}\mu & -\frac{1}{3}\mu & -\frac{1}{3}\mu & 0 & 0 & 0 \\ & \frac{2}{3}\mu & -\frac{1}{3}\mu & \mu & 0 & 0 \\ & & \frac{2}{3}\mu & \mu & 0 & 0 \\ & & & \frac{1}{2}\mu & 0 & 0 \\ & \text{simétrica} & & & \frac{1}{2}\mu & 0 \\ & & & & & \frac{1}{2}\mu \end{bmatrix}. \quad (39)$$

#### 4.1. Condensación estática de la burbuja

Despejemos  $\mathbf{b}$  de la ecuación (37):

$$\mathbf{b} = \mathbf{K}_{bb}^{-1} (\mathbf{F}_b - \mathbf{K}_{bp} \mathbf{P}) \quad (40)$$

Luego, podemos eliminar  $\mathbf{b}$  de la ecuación (38), que toma la forma

$$\mathbf{R}_p = \mathbf{K}_{up}^T \mathbf{U} + (\mathbf{K}_{pp} - \mathbf{K}_{bp}^T \mathbf{K}_{bb}^{-1} \mathbf{K}_{bp}) \mathbf{P} - \mathbf{F}_p + \mathbf{K}_{bp}^T \mathbf{K}_{bb}^{-1} \mathbf{F}_b = \mathbf{0} \quad (41)$$

#### 4.2. Homogeneización

A fin de homogeneizar las ecuaciones (36) y (41), remplacemos  $\mathbf{R}_p$  por

$$\mathbf{R}_p^* = \alpha \mathbf{R}_p \quad (42)$$

donde el factor de homogeneización  $\alpha$  tiene dimensión de fuerza por unidad de volumen. Aquí lo calculamos como

$$\alpha = \frac{\kappa^e}{h} \quad (43)$$

siendo  $h^e$  la dimensión de un elemento típico. Si el módulo de compresibilidad  $\kappa$  no fuera constante, debería tomarse un valor característico del mismo para definir  $\alpha$ .

El sistema de ecuaciones (36) y (41) para las incógnitas  $\mathbf{U}$  y  $\mathbf{P}$  pierde la simetría tras la homogeneización. Para recuperarla, adoptemos como incógnitas

$$\mathbf{P}^* = \frac{1}{\alpha} \mathbf{P} \quad (44)$$

en lugar de  $\mathbf{P}$ . Nótese que ahora todas las incógnitas nodales tienen dimensión de desplazamiento.

Luego,  $\mathbf{U}$  y  $\mathbf{P}^*$  se obtienen como solución del sistema

$$\mathbf{R}_u = \mathbf{R}_{uu}(\mathbf{U}) + \mathbf{K}_{up}^* \mathbf{P}^* - \mathbf{F}_u = \mathbf{0} \quad (45)$$

$$\mathbf{R}_p^* = \mathbf{K}_{up}^{*T} \mathbf{U} + \mathbf{K}_{pp}^* \mathbf{P}^* - \mathbf{F}_p^* = \mathbf{0} \quad (46)$$

donde

$$\mathbf{R}_p^* = \alpha \mathbf{R}_p \quad (47)$$

$$\mathbf{K}_{up}^* = \alpha \mathbf{K}_{up} \quad (48)$$

$$\mathbf{K}_{pp}^* = \alpha^2 (\mathbf{K}_{pp} - \mathbf{K}_{bp}^T \mathbf{K}_{bb}^{-1} \mathbf{K}_{bp}) \quad (49)$$

$$\mathbf{F}_p^* = \alpha (\mathbf{F}_p - \mathbf{K}_{bp}^T \mathbf{K}_{bb}^{-1} \mathbf{F}_b) \quad (50)$$

### 4.3. Linearización

El sistema de ecuaciones (45) y (46) es no lineal en presencia de deformación inelástica. En ese caso, dicho sistema será resuelto iterativamente usando el método de Newton-Raphson, para lo cual debe ser linealizado de la forma

$$\begin{bmatrix} \mathbf{R}_u \\ \mathbf{R}_p^* \end{bmatrix} = - \begin{bmatrix} \mathbf{K}_{uu} & \mathbf{K}_{up}^* \\ \mathbf{K}_{up}^{*T} & \mathbf{K}_{pp}^* \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \Delta \mathbf{U} \\ \Delta \mathbf{P}^* \end{bmatrix} \quad (51)$$

donde

$$\mathbf{K}_{uu} = \int_{\Omega} \mathbf{B}^T \mathbf{D}^i \mathbf{B} \, dV \quad (52)$$

con

$$\mathbf{D}^i = \begin{bmatrix} \frac{\partial s_{11}}{\partial \varepsilon_{11}} & \frac{\partial s_{11}}{\partial \varepsilon_{22}} & \frac{\partial s_{11}}{\partial \varepsilon_{33}} & \frac{\partial s_{11}}{\partial \varepsilon_{12}} & \frac{\partial s_{11}}{\partial \varepsilon_{23}} & \frac{\partial s_{11}}{\partial \varepsilon_{31}} \\ \frac{\partial s_{22}}{\partial \varepsilon_{11}} & \frac{\partial s_{22}}{\partial \varepsilon_{22}} & \frac{\partial s_{22}}{\partial \varepsilon_{33}} & \frac{\partial s_{22}}{\partial \varepsilon_{12}} & \frac{\partial s_{22}}{\partial \varepsilon_{23}} & \frac{\partial s_{22}}{\partial \varepsilon_{31}} \\ \frac{\partial s_{33}}{\partial \varepsilon_{11}} & \frac{\partial s_{33}}{\partial \varepsilon_{22}} & \frac{\partial s_{33}}{\partial \varepsilon_{33}} & \frac{\partial s_{33}}{\partial \varepsilon_{12}} & \frac{\partial s_{33}}{\partial \varepsilon_{23}} & \frac{\partial s_{33}}{\partial \varepsilon_{31}} \\ \frac{\partial s_{12}}{\partial \varepsilon_{11}} & \frac{\partial s_{12}}{\partial \varepsilon_{22}} & \frac{\partial s_{12}}{\partial \varepsilon_{33}} & \frac{\partial s_{12}}{\partial \varepsilon_{12}} & \frac{\partial s_{12}}{\partial \varepsilon_{23}} & \frac{\partial s_{12}}{\partial \varepsilon_{31}} \\ \frac{\partial s_{23}}{\partial \varepsilon_{11}} & \frac{\partial s_{23}}{\partial \varepsilon_{22}} & \frac{\partial s_{23}}{\partial \varepsilon_{33}} & \frac{\partial s_{23}}{\partial \varepsilon_{12}} & \frac{\partial s_{23}}{\partial \varepsilon_{23}} & \frac{\partial s_{23}}{\partial \varepsilon_{31}} \\ \frac{\partial s_{31}}{\partial \varepsilon_{11}} & \frac{\partial s_{31}}{\partial \varepsilon_{22}} & \frac{\partial s_{31}}{\partial \varepsilon_{33}} & \frac{\partial s_{31}}{\partial \varepsilon_{12}} & \frac{\partial s_{31}}{\partial \varepsilon_{23}} & \frac{\partial s_{31}}{\partial \varepsilon_{31}} \end{bmatrix} \quad (53)$$

Notar que para materiales elásticos e inelásticos con regla de flujo tipo  $J_2$ , resulta

$$\frac{\partial s_{ij}}{\partial \varepsilon_{kl}} = \frac{\partial \sigma_{ij}}{\partial \varepsilon_{kl}} - \kappa \delta_{ij} \delta_{kl} \quad (54)$$

donde el primer término del lado derecho define los componentes del tensor de módulos tangentes, para cuyo cálculo referimos a [Simo y Hughes \(1998\)](#).



#### 4.4. Tratamiento de los elementos mecánicos bajo cambio de fase

Como estamos interesados en el comportamiento mecánico del material cuya temperatura es inferior a ZST, esto es, dentro de  $\Omega^s$ , pero usamos una malla fija, que en general no respeta el contorno de  $\Omega^s$ , debemos tratar de una manera especial los elementos situados sobre el contorno de  $\Omega^s$  o directamente fuera de él.

En primer lugar, los elementos fuera de  $\Omega^s$  carecen de resistencia mecánica y son directamente descartados. Los elementos atravesados por la isoterma ZST, siempre que la malla sea suficientemente fina, prácticamente no contribuyen a la rigidez global y son también descartados.

Luego, considerando un proceso de enfriamiento, un elemento se incorpora al análisis recién en el instante  $t_s$  en que la temperatura en todos sus nodos es inferior a ZST por vez primera. La deformación total  $\varepsilon$  a ese instante define la componente  $\varepsilon^s$  de la deformación inicial  $\varepsilon^0$ .

Análogamente, en un proceso de calentamiento, un elemento es descartado en el instante que alguno de sus nodos alcance ZST.

En procesos como el de soldadura multipasos involucran varios ciclos de calentamiento-enfriamiento. En cada uno de esos ciclos, habrá elementos que desaparezcan del sistema al calentarse, y vuelvan a incorporarse al enfriarse.

### 5. VALIDACIÓN

Estudiaremos las tensiones que se generan durante la solidificación de una barra semi-infinita, idealización de la etapa temprana del proceso de colada continua de planchones. Este problema ha sido resuelto analíticamente por [Weiner y Boley \(1963\)](#).

El material es un metal puro con temperatura de fusión  $T_s = T_{sol} = T_{liq}$ , que se encuentra a temperatura uniforme  $T_0 = T_s$  (o sea, sin sobrecalentamiento) a  $t = 0$ . A  $t > 0$ , se impone la temperatura  $T_w < T_s$  en el extremo  $x = 0$ , comenzando inmediatamente la solidificación del metal. Esta condición de borde simula la presencia de un molde refrigerado, en contacto perfecto con el metal colado.

Desde el punto de vista mecánico el material es elasto-plástico perfecto, con una tensión de fluencia dada por

$$Y = Y_0 \frac{T_s - T}{T_s - T_w} \quad (55)$$

donde  $Y_0$  es la tensión de fluencia a temperatura  $T_m$ . Suponemos además la temperatura de resistencia nula igual a la de fusión, esto es  $ZST = T_s$ .

La Tabla 1 lista todas las propiedades térmicas y mecánicas asumidas en este estudio, típicas del hierro y los aceros.

La Figura 1 muestra la malla para el análisis térmico y mecánico, compuesta de 13880 elementos finitos tetraédricos lineales, con 3221 nodos. El paso de la malla en la dirección axial resulta de 0.25 mm.

Para la integración temporal, se adopta un paso de tiempo constante de 0.1 s.

En cuanto a las condiciones de borde térmicas, a excepción de la cara  $x = 0$  con temperatura impuesta  $T_m$ , la superficie de la barra se supone adiabática.

Para el análisis mecánico, se imponen las fijaciones  $u_x = 0$  en  $x = 0$ ,  $u_y = 0$  en  $y = 0$  y  $u_z = 0$  e  $z = 0$ . En las caras  $y = 1$  mm y  $z = 1$  mm, se imponen condiciones de deformación plana generalizada, es decir que esas caras pueden desplazarse sólo paralelamente a sí mismas.

La Figura 2 muestra el campo de temperaturas a  $t = 20$  s.

Temperatura de fusión	$T_s = 1741\text{K}$
Temperatura del molde	$T_w = 1573\text{K}$
Densidad	$\rho = 7400\text{ kg/m}^3$
Calor latente de fusión	$L = 272000\text{ J/kg}$
Calor específico	$c_p = 700\text{ J/(kg K)}$
Conductividad térmica	$\kappa = 33\text{ W/(m K)}$
Temperatura de resistencia nula	$ZST = 1741\text{K}$
Módulo de Young	$E = 40000\text{ MPa}$
Coefficiente de Poisson	$\nu = 0,35$
Tensión de fluencia a $T_m$	$Y_0 = 40\text{ MPa}$
Coefficiente de expansión térmica	$\alpha_T = 8,46354 \times 10^{-5}/\text{K}$

Tabla 1: Propiedades térmicas y mecánicas para el problema de validación.

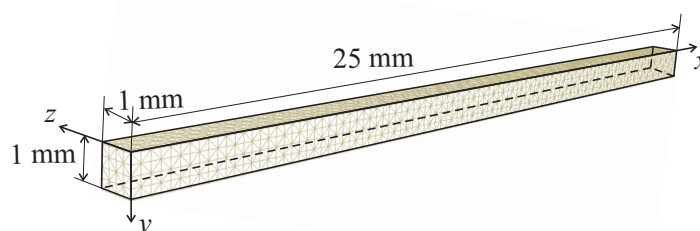


Figura 1: Malla de elementos finitos para el problema de validación.

La Figura 3 muestra las soluciones para el campo de tensiones  $\sigma_{yy}$  a  $t = 20\text{ s}$  que se obtienen usando tetraedros P1 y P1<sup>+</sup>/P1. Se observa allí que con el uso de elementos P1<sup>+</sup>/P1 no exhiben el comportamiento espúreo de los elementos P1 en problemas como este, donde la deformación es predominantemente plástica e isocórica.

La Figura 4 muestra la tensión  $\sigma_{yy}$  a lo largo del eje de la barra a  $t = 20\text{ s}$ , evidenciando cuán precisa es la solución obtenida usando elementos finitos P1<sup>+</sup>/P1 en comparación con la solución analítica exacta de [Weiner y Boley \(1963\)](#).

## 6. CONCLUSIÓN

En este trabajo se ha presentado una estrategia de modelización de procesos termo-mecánicos en cuerpos en curso de solidificación, o bien en ciclos de solidificación enfriamiento. La metodología propuesta permite abordar tanto el análisis térmico como el mecánico usando elementos finitos tetraédricos lineales.

El modelo fue validado aplicado a un problema de generación de tensiones durante la solidificación de una barra de material inelástico.

Aplicaciones a problemas industriales como la colada y la soldadura serán presentadas en trabajos futuros.

## 7. AGRADECIMIENTOS

Se agradece a las entidades financiadoras de los proyectos que encuadran este trabajo:

- RAPOLAC (Rapid Production of Large Aerospace Components), contrato AST 5-CT 2006-030953, financiado por la Comunidad Europea.

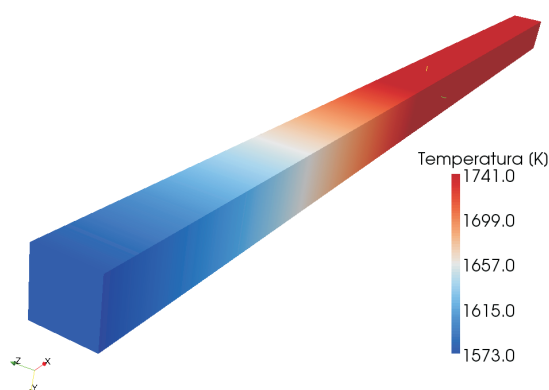


Figura 2: Problema de validación: temperatura a  $t = 20$  s.

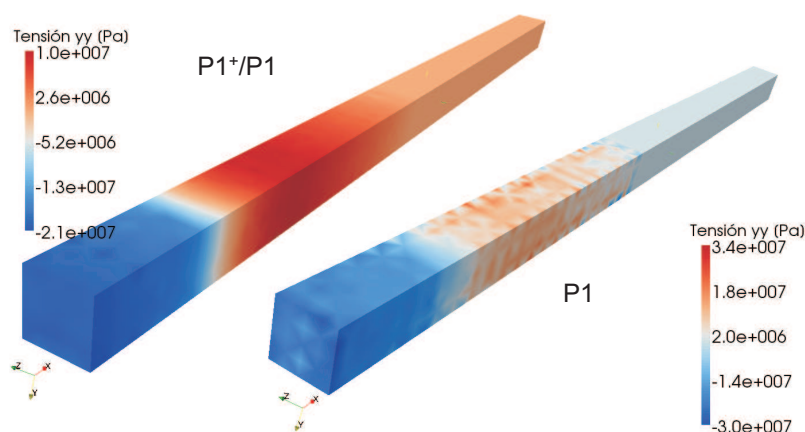


Figura 3: Problema de validación: tensión  $\sigma_{yy}$  a  $t = 20$  s. Solución usando elementos P1+/P1 vs. P1.

- Modelización Numérica de Soldadura por Fusión, PICT-2006-01542, financiado por la Agencia Nacional de Promoción Científica y Tecnológica (ANPCyT, Argentina) a través del Fondo para la Investigación Científica y Tecnológica (FONCyT).
- Simulación Computacional en Procesos de Soldadura, CAI+D 2009 Tipo II PI-65-331, financiado por la Universidad Nacional del Litoral (UNL, Argentina).
- Simulación en Mecánica Computacional de Procesos que involucran varios Campos Acoplados (Multifísica) con Aplicación al Diseño de Procedimientos de Soldadura y de Dispositivos en Microelectromecánica, PIP 112-200801-02473, financiado por el Consejo Nacional de Investigaciones Científicas y Técnicas (CONICET, Argentina).

## REFERENCIAS

- Anca A.A. *Computer Simulation of Steel Thermomechanical Processes at High Temperatures*. Tesis de Doctorado, Facultad de Ingeniería y Ciencias Hídricas, Universidad Nacional del Litoral, Santa Fe, Argentina, 2008.
- Arnold D.N., Brezzi F., y Fortin M. A stable finite element for the stokes equations. *Calcolo*, 21(4):337–344, 1984.
- Cervera M., Chiumenti M., Valverde Q., y Agelet de Saracibar C. Mixed linear/linear simplicial

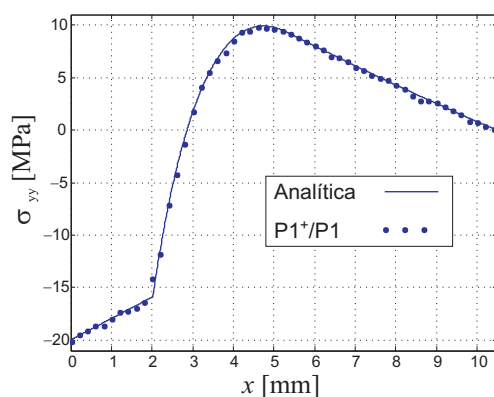


Figura 4: Problema de validación: tensión  $\sigma_{yy}$  a lo largo del eje de la barra a  $t = 20$  s. Solución usando elementos P1<sup>+</sup>/P1 vs. solución analítica (Weiner y Boley, 1963).

elements for incompressible elasticity and plasticity. *Comput. Methods Appl. Mech. Engrg.*, 192:5249–5263, 2003.

Chiumenti M., Valverde Q., Agelet de Saracibar C., y Cervera M. A stabilized formulation for incompressible plasticity using linear triangles and tetrahedra. *Int. J. Plasticity*, 20:1487–1504, 2004.

Costes F. *Modélisation thermomécanique tridimensionnelle par éléments finis de la coulée continue d'aciers*. Tesis de Doctorado, École Nationale Supérieure des Mines de Paris, 2004.

Fachinotti V.D. *Modelado Numérico de Fenómenos Termomecánicos en la Solidificación y Enfriamiento de Aceros Obtenidos por Colada Continua*. Tesis de Doctorado, Facultad de Ingeniería y Ciencias Hídricas, Universidad Nacional del Litoral, Santa Fe, Argentina, 2001.

Fachinotti V.D. y Cardona A. Constitutive models of steels under continuous casting conditions. *J. Mat. Proc. Tech.*, 135:30–43, 2003.

Fachinotti V.D. y Cardona A. A fixed-mesh eulerian-lagrangian approach for stress analysis in continuous casting. *Int. J. Numer. Methods Engrg.*, 70:728–755, 2007.

Fachinotti V.D., Cardona A., y Huespe A.E. A fast convergent and accurate temperature model for phase-change heat conduction. *Int. J. Numer. Methods Engrg.*, 44:1863–1884, 1999.

Fachinotti V.D., Cardona A., y Huespe A.E. Finite element model for 3D conduction-advection problems with phase change. En *European Congress on Computational Methods in Applied Sciences and Engineering (ECCOMAS 2000)*. Barcelona, España, 2000.

Jaouen O. *Modélisation tridimensionnelle par éléments finis pour l'analyse thermo-mécanique du refroidissement des pièces coulées*. Tesis de Doctorado, École Nationale Supérieure des Mines de Paris, 1998.

Nakagawa T., Umeda T., Murata J., Kamimura Y., y Niwa N. Deformation behavior during solidification of steels. *ISIJ International*, 35(6):723–729, 1995.

Simo J.C. y Hughes T.J.R. *Computational Inelasticity*. Springer-Verlag, New York, 1998.

Weiner J.H. y Boley B.A. Elasto-plastic thermal stresses in a solidifying alloy. *J. Mech. Phys. Solids*, 11:145–154, 1963.

Yamanaka A., Nakajima K., y Okamura K. Critical strain for internal crack formation in continuous casting. *Ironmaking and Steelmaking*, 22(6):508–512, 1995.