

Desarrollo de Simuladores para Procesos Industriales. Parte III (Colada continua)*

A. Ramírez**, R. Morales***, A. J. Morales***, A. Ramos**** y G. Solorio*****

Resumen Este trabajo muestra el empleo de técnicas de métodos de Monte Carlo y generación de números aleatorios en combinación con datos obtenidos del sistema de simulación (SSCC) para comportamiento térmico previamente descrito para la reproducción computacional del proceso de solidificación del acero y simular la formación de estructuras de colada paso a paso.

Palabras clave Colada continua. Solidificación. Métodos estocásticos. Granos y dendritas.

Development of industry processes simulators. Part III (Continuous casting)

Abstract This work was written for illustrating the use of Monte Carlo methods and generating of random number in combination with the information of the simulation system for thermal behavior described previously in order to reproduce in a computer the solidification process of the steel and simulate the formation of structures of casting step by step.

Keywords Continuous casting. Solidification. Stochastic methods. Grains and dendrites.

1. INTRODUCCIÓN

Una vez realizadas las partes concernientes a la descripción física del proceso de colada continua y la resolución de la influencia de las condiciones de enfriamiento sobre el comportamiento térmico del acero^[1-2], la siguiente etapa del proceso de desarrollo del sistema de simulación es crear una serie de algoritmos y un ambiente de plataforma para representar la posible estructura dendrítica del producto a obtener.

La estructura de colada obtenida de los perfiles de acero se puede dividir en tres diferentes zonas, en función de su morfología; estas zonas fueron

estudiadas, inicialmente, por Flemmings^[3] y, posteriormente, por diversos autores^[4-9], quienes han desarrollado algoritmos matemáticos o empleado paquetes de simulación para modelar el proceso de solidificación^[3-20]. Algunos autores han realizado trabajos simulando las direcciones de crecimiento de las bases de las dendritas con ecuaciones de funciones trigonométricas^[3-7], otros, han desarrollado modelos de fases, tomando en consideración algunos fenómenos involucrados como la recristalización^[8-20]. Otros autores han simulado el crecimiento con diferentes tipos de mallas, desde las más simples hasta mallas no estructuradas y adaptables^[16-20], etc. Sin embargo, los procesos de solidificación aún

* Trabajo recibido el día 22 de agosto de 2005 y aceptado en su forma final el día 10 de marzo de 2006.

** Instituto Politécnico Nacional (SEPI-ESIME-UPT-IPN).

*** Instituto Politécnico Nacional (SEPI-ESIQIE-UPALM-IPN).

**** Instituto Tecnológico de Morelia Michoacán México (Depto. de posgrado).

***** Universidad Michoacana de San Nicolás de Hidalgo (Depto. de posgrado).

son tratados de manera independiente. El propósito de este trabajo es presentar un modelo matemático desarrollado para simular las estructuras de colada, utilizando los datos de comportamiento térmico calculados.

2. ESTRUCTURAS DE COLADA

Las zonas que componen la estructura de un perfil producido por colada continua son las siguientes:

- Zonas dendríticas:
 - Perimetral.
 - Columnar.
 - Central (equiaxial).

La zona perimetral es la primera zona que se forma durante el proceso de solidificación en el borde del perfil y, por tanto, presenta una alta velocidad de solidificación; es debida a un enfriamiento brusco que se da dentro del molde de la MCC y como resultado de esto el acero pasa, casi instantáneamente, de estado líquido a sólido y permanece muy poco tiempo en estado pastoso; por lo que se forman una gran cantidad de puntos de nucleación, aceleradamente, los cuales producen una gran cantidad de pequeños granos de orientación aleatoria.

La zona columnar es la zona intermedia del perfil; la velocidad de solidificación en esta zona es media y como resultado de ello se generan puntos de solidificación que parten del borde con la zona perimetral, que son los siguientes puntos a solidificar en el proceso de colada y se da un crecimiento orientado perpendicularmente a las superficies del perfil, dando como resultado granos alargados con dirección al centro del perfil. Cerca de las esquinas del perfil, los granos columnares crecen hasta chocar con aquellos que crecen perpendicularmente a los otros, mientras que los que se encuentran en el centro, simplemente, avanzan hacia el centro, es decir, en dirección contraria al flujo de calor.

La zona central es una zona en la cual la velocidad de solidificación es muy baja debido a que la extracción de calor del centro del perfil es muy lenta; debido a ello, en esta zona coexisten los mecanismos de nucleación y crecimiento; es decir, en esta zona se pueden encontrar puntos que solidifican dispersos en una región en estado pastoso, que crecen de manera polidireccional por lo que la morfología en esta zona es de granos aleatoriamente orientados pero de mayor tamaño.

3. MODELO MATEMÁTICO

El modelo matemático descrito en este trabajo emplea los datos obtenidos del cálculo del comportamiento térmico de los perfiles mencionados en traba-

jos anteriores^[1-2]. Por tanto, se utiliza la misma malla reticular para discretizar el acero. Como resultado del cálculo térmico mencionado se pueden conocer las temperaturas de cada nodo, a cada instante de la simulación y, por lo tanto, su paso de estado líquido a sólido y momento en el cual ocurre. De lo anterior, se puede deducir que almacenando estos datos en memoria es posible reconstruir la historia térmica del perfil sin necesidad de recalcularla. Es importante mencionar esto ya que el modelo matemático desarrollado puede o no trabajar de manera simultánea con el modelo de cálculo térmico.

El primer paso de la simulación es calcular las dimensiones de las zonas perimetral, columnar y central del centro del perfil. Para lo cual, el modelo matemático desarrollado emplea los datos de tiempos de cambio de estado del acero ($t_{liq,I,J}$, $t_{sol,I,J}$) del simulador de comportamiento térmico, previamente calculados utilizando las rutinas del SSCC descritas anteriormente por los presentes autores^[1-2]. Una vez leídos estos datos se procede a calcular el tiempo de permanencia de cada elemento de discretización (nodo) en estado pastoso ($t_{pas,I,J}$) utilizando la ecuación (1).

$$t_{pas,I,J} = t_{liq,I,J} - t_{sol,I,J} \quad (1)$$

Determinar las dimensiones de las zonas perimetral y columnar (L_1 y L_2) que se muestran en la figura 1 es el primer paso a realizar y se obtienen mediante un análisis nodal de cada elemento con respecto a sus nodos vecinos. Como se muestra en la figura 2, cada nodo tiene 8 vecinos inmediatos y el análisis consta de los siguientes pasos:

1. Analizar cada nodo a cada instante de la simulación, cada uno de los cuales será llamado nodo pivote.

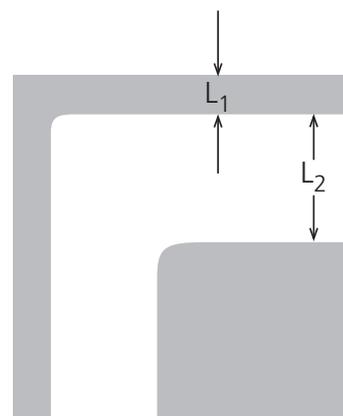


Figura 1. Longitudes de las zonas perimetral, columnar y central.

Figure 1. Longitudes of the chill, columnar and equiaxed zones.

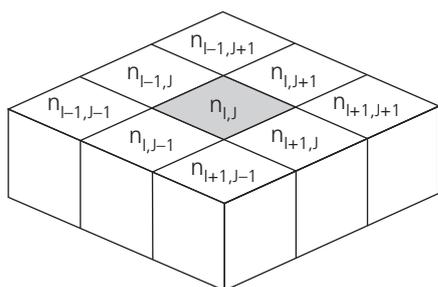


Figura 2. Vecinos de nodo pivote.

Figure 2. Neighbors of a pivoting node.

2. Verificar si el nodo pivote solidifica en el instante de la simulación.
 - En caso de no ser así se procede a analizar el siguiente nodo.
 - En caso de ser así se verifica cual es el mecanismo de solidificación que actúa sobre este nodo en función a la zona en la que se encuentra, para lo cual se efectuarán los pasos (3 a 5).
3. Encontrar si algún o algunos nodos vecinos han solidificado previamente.
4. Calcular cual de los vecinos solidifico primero.
5. Calcular con qué vecino tiene una mayor probabilidad de crecer si es su caso; esto, se hace calculando el nodo con el que tienen la menor diferencia de tiempo de solidificación por medio de una comparación de tiempos con todos los vecinos.

Este procedimiento es función del tiempo y se ilustra de manera ordenada en la figura 3. En ella, el valor de la variable (t) adquiere los valores de (t_1 y t_2) que son criterios basados en los tiempos de residencia del acero en estado pastoso, para determinar la zona a la que corresponde cada nodo. Para el caso de la zona perimetral, debido a que el paso de estado líquido a sólido es prácticamente inmediato, este criterio tiene un valor muy pequeño (t_1), mientras que para delimitar las zonas columnar y central (t_2), este valor es mayor debido a que el acero permanece mayor tiempo en estado pastoso.

El ciclo de tiempo controla la simulación y el tiempo en el que solidifica el ultimo nodo es el tiempo de solidificación (t_{max}); si el tiempo de solidificación de un nodo pivote es igual al tiempo de la simulación ($t_{i,j} = t$), se considera que este nodo solidifica en ese instante y se procede a la identificación de la zona a la cual pertenece.

En este diagrama, el proceso de ampliación es un proceso de extrapolación a los valores de los tiempos de residencia, que se aplica con el objeto de

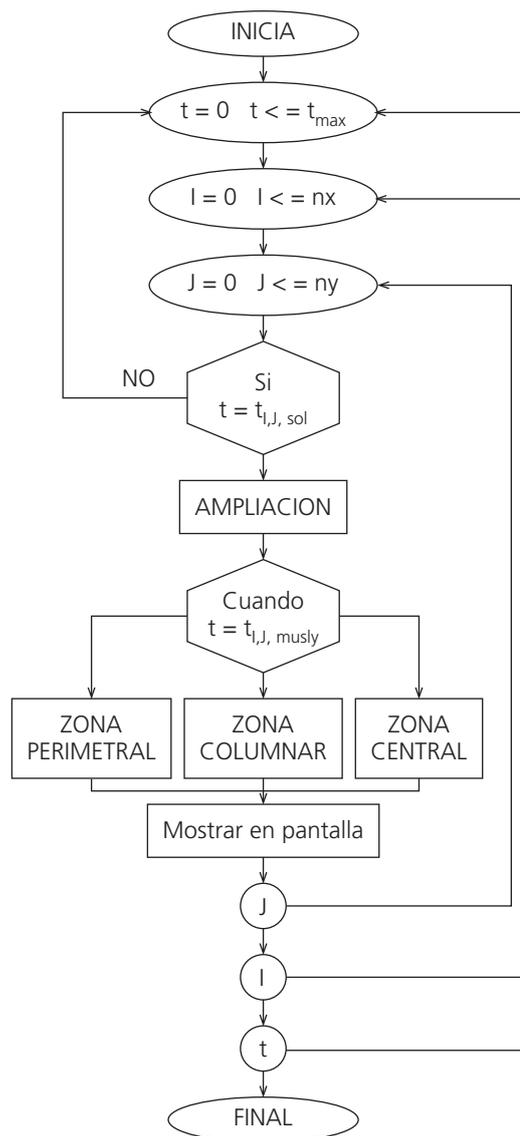


Figura 3. Diagrama de flujo para determinar la zona de grano de todos los nodos.

Figure 3. Flow chart for selecting the grain zones of the nodes.

hacer mas fino al mallado de discretización y obtener una mejor aproximación en la simulación.

Es importante, también, mencionar que las dimensiones de las zonas del perfil pueden definirse en función al tamaño promedio medido de estas, mediante el análisis y conteo de muestras; sin embargo, se consideró más apropiado ponerlos en función al tiempo de permanencia de estos, en estado pastoso, para hacer congruente su simulación con el análisis térmico.

Los gradientes de la figuras 4 muestran la clasificación en intervalos, hecha para los tiempos de permanencia en los estados líquido, pastoso y sólido, en las que se puede apreciar que la morfología más aproximada en dimensiones es la que resulta del

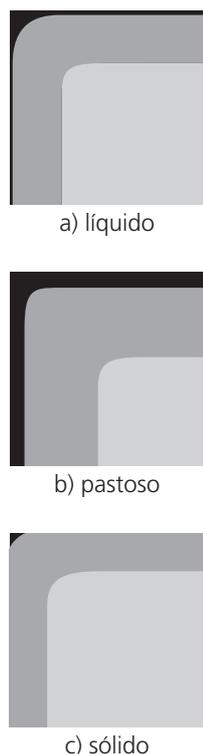


Figura 4. Clasificación de nodos en función a su tiempo de residencia utilizando intervalos y criterios.

Figure 4. Nodes classified as a function of the residence time using ranges and criterions.

análisis de tiempo de residencia en estado pastoso, considerando los valores de ($t_1=2s$) y de ($t_2=12s$) como criterios.

El siguiente paso es desarrollar algoritmos que puedan simular los procesos de nucleación y crecimiento de las dendritas para cada una de las zonas. Para lo cual se sigue el procedimiento descrito a continuación.

Cuando el nodo solidifica se genera un número aleatorio que es comparado con los valores de probabilidad (P_c y P_n) que representan las posibilidades de crecer o nuclear del nodo, respectivamente, para el caso de la zona perimetral ($P_n > P_c$), mientras que para el caso de las zonas columnar y central se tendrá que ($P_n < P_c$). El resultado desplegado será la representación de un nuevo grano o bien la adición del nodo con uno ya existente, describiéndose este procedimiento en la figura 5. Este algoritmo pertenece al grupo de métodos estocásticos que se utilizan para simular varios fenómenos naturales y utilizan técnicas de selección aleatorias y estadísticas, para ello.

En el caso de que el algoritmo determine que el nodo será parte de un grano que crece se sigue un procedimiento en función a la zona a que pertenece y como se muestra en la figura 6 existen dos posibilidades de crecimiento.

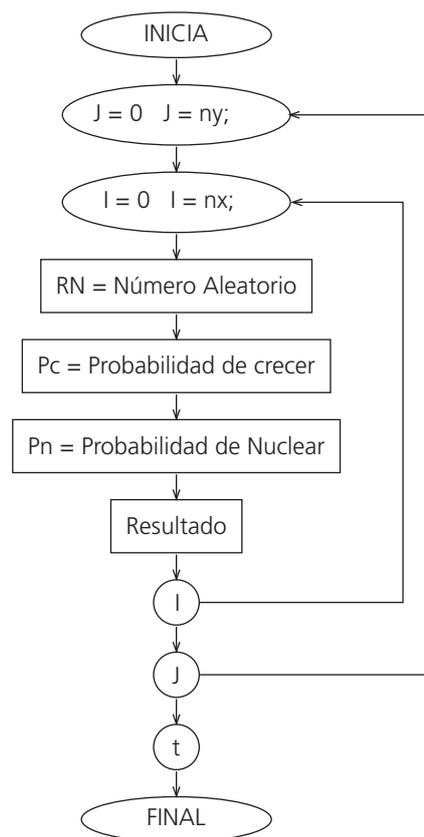


Figura 5. Diagrama de flujo para determinar si un nodo que solidifica nuclea o crece.

Figure 5. Flow chart for selecting if a node is growth or nuclei.

En el caso (a) se muestra una posibilidad de crecimiento poli-direccional con respecto a los 8 vecinos del nodo en análisis. Este tipo de consideración se lleva a cabo si el nodo es de las zonas perimetral o central. Mientras que el caso (b) representa una posibilidad de crecimiento orientado hacia los puntos cardinales, la cual es empleada en la zona columnar para evidenciar un crecimiento orientado perpendicularmente a las superficies del perfil colado.

Las posibilidades de crecimiento en una u otra dirección varían, para cada nodo, en cada instante de la simulación, en función a su posición ya que cada nodo en proceso de solidificación tiene diferentes vecinos solidificados.

Para el caso de la zona central se considera, adicionalmente, que coexisten los procesos de nucleación y crecimiento sin que el nodo en análisis haya solidificado en el tiempo (t) de la simulación, necesariamente; por lo que la rutina de la figura 5 se realiza para determinar si existe alguna posibilidad de que el nodo nuclea antes de su tiempo de solidificación calculado en función del porcentaje (sólido-líquido) de su composición a cada instante, que es

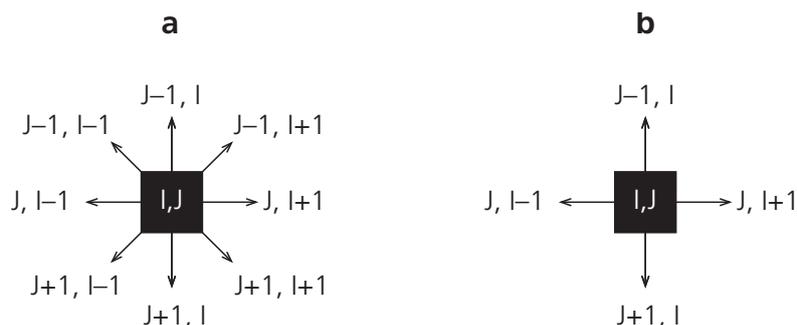


Figura 6. Direcciones de crecimiento de un grano.

Figure 6. Directions for grain growth.

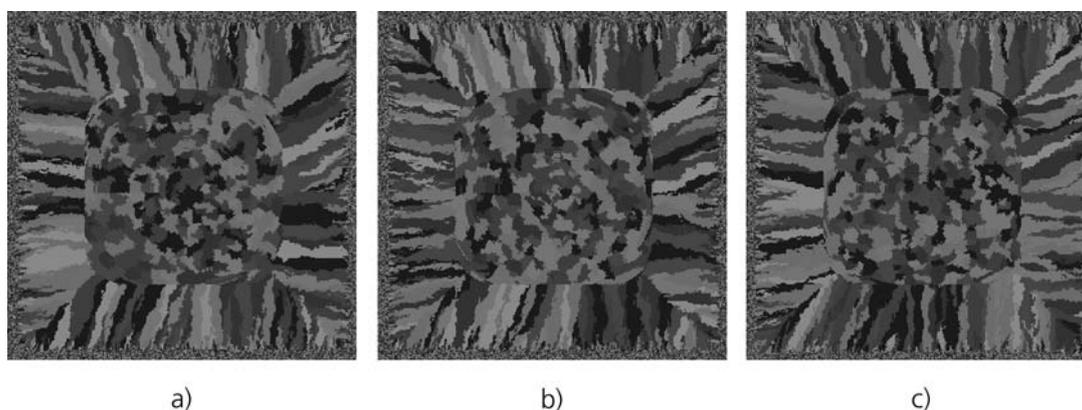


Figura 7. Estructura simuladas

Figure 7. Simulated structures.

calculado empleando la ecuación (2). A este fenómeno se le llama pre-solidificación y el criterio utilizado es que es posible que el nodo solidifique cuando ($X_{sol,I,J} > 0.5$); esto es posible ya que las fracciones de sólido y líquido se pueden considerar en función al tiempo de solidificación del perfil.

$$X_{sol,I,J} = \frac{t - t_{sol,I,J}}{t_{sol,I,J} - t_{liq,I,J}} \quad (2)$$

Dentro del proceso de pre-solidificación existe la posibilidad de que un nodo pre-nuclee ó pre-crezca con algún nodo vecino también pre-solidificado. Por lo que este proceso se realiza en un ciclo anidado dentro del análisis para los nodos de la zona central y, del mismo modo, se pueden asignar probabilidades preferenciales de crecimiento con los nodos más cercanos y con los que tenga la menor diferencia en tiempo, mientras que los nodos aun sin solidificar son ignorados. Este procedimiento, permite que aparezcan puntos de solidificación de manera aleatoria a cada momento de la simulación y que, estos,

puedan crecer. Como resultado se obtienen diferentes morfologías de granos.

4. SIMULACIÓN DE ESTRUCTURAS

El resultado del empleo de todo este modelo matemático se muestra en las figuras (7a-7c) donde se muestran simulaciones de estructuras de colada para las condiciones descritas en trabajos anteriores^[1-2]. Aquí, se identifican fácilmente las zonas del perfil y los diferentes tipos de grano.

Las características generales son iguales, sin embargo, cada simulación tiene características y formas independientes como resultado del empleo de métodos estocásticos.

5. CONCLUSIONES

Las simulaciones obtenidas con el modelo matemático desarrollado presentan una gran similitud en comparación con la morfología de granos que muestran

varios investigadores^[3-20] en sus trabajos, por lo que se puede considerar como confiable.

El modelo demuestra por lo tanto que es posible utilizar condiciones reales de operación para realizar una aproximación de la posible estructura a obtener.

Agradecimientos

Los presentes autores manifiestan su agradecimiento a las instituciones CONACyT, IPN y a los Ingenieros Edgar Muñoz, Omar Navarro y Jesús Báez de la compañía ATLAX por su colaboración en el presente trabajo.

REFERENCIAS

- [1] A. RAMIREZ, R. MORALES, A. RAMOS Y G. SOLORIO, *Rev. Metal. Madrid* 42 (2006), 203-208.
- [2] A. RAMIREZ, A. MOSQUEDA, V. SAUCE, R. MORALES, A. RAMOS Y G. SOLORIO, *Rev. Metal. Madrid* 42 (2006), 209-215.
- [3] M.C. FLEMINGS, *Solidification Processing*, Ed. McGraw, Hill Book Co., New York, EE.UU., 1974, pp. 130-140.
- [4] W. OLDFIELD, *ASM Trans.* 59 (1966) 945-961.
- [5] N. PROVATAS, N. GOLDENFIELD Y A. DANTZING, *Phys. Rev. Lett.* 80 (1998) 3.308-3.311.
- [6] W. FENG, Q. XU Y B. LIU, *ISIJ* 42 (2002) 702-707.
- [7] N.P. LOUAT, *Acta Metall* 22 (1974) 721-726.
- [8] N.P. LOUAT Y M.S. DUESBERY, *Mater. Sci. Forum* (1992) 67-76 y 94-96.
- [9] O.M. IVASISHIN, S.V. SHEVCHENKO Y N.L. VASILIEV, *Acta Mater.* 51 (2003) 1.019-1.034.
- [10] A.M. GUSAK Y K.N. TU, *Acta Mater.* 51 (2003) 3.895-3.904.
- [11] C.W. LAN, Y.C. CHANG Y C.J. SHIH, *Acta Mater.* 51 (2003) 1.857-1.869.
- [12] E.A. HOLM, M.A. MIODOWNIK Y A.D. ROLLETT, *Acta Mater.* 51 (2003) 2.701-2.716.
- [13] S. MISHRA Y T. DEBROY, *Acta Mater.* 52 (2004) 1.183-1.192.
- [14] C.E. KRILL III Y L.Q. CHEN, *Acta Mater.* 50 (2002) 3.057-3.073.
- [15] A. CARPINTERI, B. CHIAIA, P. CORNETTI, *Mater. Sci. Eng. A* 365 (2004) 235-240.
- [16] H. YOSHIOKA, Y. TADA Y Y. HAYASHI, *Acta Mater.* 52 (2004) 1.515-1.523.
- [17] Y.J. LAN, D.Z. LI Y Y.Y. LI, *Acta Mater.* 52 (2004) 1.721-1.729.
- [18] K. YEE Y C. P. HONG, *ISIJ* 37 (1997) 38-46.
- [19] Y. H. SHIN Y C. P. HONG, *ISIJ* 42 (2002) 359-367.
- [20] M. F. ZHU Y C. P. HONG, *ISIJ* 41 (2001) 436-445.
- [21] M. F. ZHU, J. M. KIM Y C. P. HONG, *ISIJ* 41 (2001) 992-998.
- [22] M. QAN Y Z.X.GUO, *Mater. Sci. Eng. A* 365 (2004) 180-185.