



Universidade de Vigo



Universidad
Carlos III de Madrid



POLITÉCNICA

Máster en Matemática Industrial

2018 – 2019

Trabajo Fin de Máster

Simulación numérica del daño producido sobre el canal principal de un horno alto

Iván Martínez Suárez

Fecha presentación: Julio de 2019

Tutor/a académico/a: Patricia Barral Rodiño

Empresa: ArcelorMittal

Tutor/a empresa: Alejandro García-Lengomín Pieiga



ArcelorMittal

Índice general

1. Introducción	1
2. Descripción de la empresa	3
2.1. ArcelorMittal Global	3
2.2. ArcelorMittal España	4
3. Descripción del problema físico	7
3.1. Proceso siderúrgico integral	7
3.2. Canal principal del horno alto	8
4. Análisis de los fenómenos a estudiar	13
4.1. Composición del hormigón refractario del canal principal	13
4.2. Ataque químico y erosivo de la escoria	14
4.3. Impacto térmico de la colada	16
4.4. Impacto mecánico de la colada	16
4.5. Propiedades de los materiales	17
5. Modelización matemática del daño en el hormigón	19
5.1. Introducción	19
5.2. Modelización matemática del daño	20
5.2.1. Daño isótropo unidimensional	21
5.2.2. Daño isótropo tridimensional	23
5.3. Modelos de daño para el hormigón	30
5.3.1. Modelo de daño de Mazars para el hormigón	30
5.3.2. Modelo de Mazars implementado en Code Aster	33
6. Modelización matemática del flujo multifásico del canal principal	39
6.1. Introducción	39
6.2. Modelo hidrodinámico	39
6.2.1. Flujo de superficie libre	40
6.2.2. Modelo hidrodinámico	41
6.3. Modelo térmico	41
7. Simulación numérica	43
7.1. Descripción de los paquetes de software utilizados	43
7.1.1. Code Aster	43
7.1.2. MFront: inclusión de la deformación térmica en el modelo	44

7.2.	Consideraciones generales	44
7.3.	Test numéricos	45
7.3.1.	Parámetros	46
7.3.2.	Geometría y malla	46
7.3.3.	Test 1: Modelo mecánico con daño. Desplazamiento lineal .	48
7.3.4.	Test 2: Modelo mecánico con daño. Desplazamiento no lineal	49
7.3.5.	Test 3: Modelo termomecánico con daño. Temperatura lineal	53
7.3.6.	Test 4: Modelo termomecánico con daño. Temperatura no lineal	56
7.3.7.	Test 5: Modelo termomecánico con daño. Tensión no nula. .	60
7.4.	Problema del canal principal	64
7.4.1.	Geometría y malla	64
7.4.2.	Parámetros	66
7.4.3.	Cargas aplicadas y condiciones de contorno	67
7.4.4.	Resolución del problema mecánico	69
7.4.5.	Resolución del problema termomecánico	70
8.	Conclusiones y futuras líneas de investigación	75

Capítulo 1

Introducción

La siderurgia, de gran importancia económica para el sector industrial, es la encargada del proceso de fabricación del acero. En general, los procesos de producción en esta industria son bastante tradicionales y se fundamentan en los hornos altos, grandes recipientes que almacenan una mezcla líquida de materiales (arrabio y escoria) que, posteriormente tratada, se convertirá en acero. Esta mezcla se vierte a muy alta temperatura en un canal de hormigón refractario, denominado *canal principal*. El objetivo de este canal es separar, por diferencia de densidad, el arrabio de la escoria. Durante el proceso, el canal resulta considerablemente dañado, además de por las elevadas temperaturas, debido a otros agentes como el ataque químico y el impacto mecánico de los líquidos. Supone un gran reto para la industria tratar de minimizar el desgaste sufrido por los materiales refractarios implicados en el proceso siderúrgico.

Tras un cierto ciclo de vida, el hormigón del canal tiene que ser sustituido por una nueva capa, de forma que se eviten posibles grietas y filtraciones de material al interior. Lo que se propone en este trabajo es modelizar y simular numéricamente el daño producido sobre el canal principal del horno alto, de modo que posteriormente se puedan acometer acciones de mejora sobre el mismo, retrasando, en la medida de lo posible, la renovación del hormigón del canal.

La empresa *ArcelorMittal* ya ha propuesto en el Taller de Problemas Industriales del Máster en Matemática Industrial varios problemas sobre la modelización del canal, que han derivado en diferentes trabajos: sobre la transferencia de calor en el canal [1, 2] y sobre el desgaste del canal por impacto de los fluidos [3].

Además, la empresa colabora con el Grupo de Investigación en Ingeniería Matemática MAT+i en el proyecto RETOS (MTM2015-68275-R) del Ministerio de Economía, Industria y Competitividad. Parte de los resultados obtenidos en la simulación termohidrodinámica del canal, que se recogen en [4], serán utilizados en este trabajo.

En el Capítulo 2 comenzamos con la presentación de la empresa que ha propuesto este trabajo, *ArcelorMittal*. A continuación, en el Capítulo 3, detallamos la realidad física del problema, partiendo de una visión global del proceso siderúrgico para centrarnos, posteriormente, en el canal principal. En el Capítulo 4 describimos los diferentes fenómenos físico-químicos que tienen lugar en el canal, enfocando nuestro análisis en los principales agentes causantes de daño en la estructura.

Puesto que nuestro estudio se centrará en el daño termomecánico que se produce en el canal principal, debido a las altas temperaturas y a las cargas mecánicas que soporta la estructura, en el Capítulo 5 presentamos la modelización matemática para esta clase de daño en hormigón, describiendo las ecuaciones que rigen este tipo de comportamiento.

En el Capítulo 6 sintetizamos los detalles más relevantes de la resolución del problema termohidrodinámico en el canal, llevada a cabo en [4], cuyos resultados utilizaremos en la simulación numérica de este trabajo. A continuación, en el Capítulo 7, procedemos a la simulación numérica del modelo anteriormente presentado. Primeramente se llevan a cabo una serie de test sobre una geometría sencilla y, posteriormente, se resuelve el problema sobre el canal principal.

Por último, en el Capítulo 8, se extraen algunas conclusiones acerca del trabajo realizado y se proponen líneas de investigación a seguir.

Capítulo 2

Descripción de la empresa

El problema a abordar en este trabajo ha sido propuesto por la empresa ArcelorMittal, una multinacional siderúrgica con presencia en España y, de forma notable, en Asturias. En lo que sigue, a partir de información oficial de la compañía (véase [5]), mostraremos la situación internacional de la empresa, continuando con sus instalaciones en España, para finalmente centrarnos de manera más específica en la planta asturiana.

2.1. ArcelorMittal Global

ArcelorMittal, resultante de la fusión de Arcelor y Mittal Steel en 2006, es la mayor compañía siderúrgica mundial, presente en 60 países y con una plantilla de unos 210 000 empleados (véase [5]). Cuenta con instalaciones industriales en 18 países y es el principal proveedor de acero de alta calidad en diversos sectores, como la construcción, el automóvil, los electrodomésticos o los envases.

Dispone de una capacidad de producción anual de 113 millones de toneladas de acero líquido, siendo el mayor productor en la Unión Europea, líder en América y África, y con una destacada posición en el resto del mundo. Alrededor del 38 % de su producción de acero se obtiene en América, el 46 % en Europa y el 16 % restante en otras regiones. Cuenta con un total de 61 hornos altos y 46 hornos de arco eléctrico, de modo que la producción de acero anual del grupo representa en torno al 6 % del total mundial.

ArcelorMittal es también empresa líder en producción minera, contando con una extensa red de minas de mineral de carbón, ubicadas en Estados Unidos y Kazajistán; también minas de hierro, situadas en Estados Unidos, Canadá, México, Brasil, Liberia, Bosnia, Ucrania y Kazajistán.

La empresa tiene alrededor de 1400 investigadores repartidos en 12 centros tecnológicos europeos y americanos, trabajando para hacer más sostenible su producción de acero y así reducir el impacto ambiental de sus actividades.

Entre las contribuciones notables de ArcelorMittal (o de sus marcas predecesoras) a construcciones famosas, cabe destacar el suministro de acero para construir gran parte de la estructura del Empire State Building, en 1929; más de 50 000 toneladas de su acero fueron empleadas en la construcción del Gran Colisionador de Hadrones, en el CERN; también se utilizaron 1200 toneladas de este material



Figura 2.1: Plantas y centros de distribución de ArcelorMittal en España (imagen de la web de ArcelorMittal).

en la construcción del parque temático Ferrari World Abu Dhabi, terminado en 2010 (véase [6]).

2.2. ArcelorMittal España

En el año 2018, ArcelorMittal produjo 5.9 millones de toneladas de acero líquido en España, es decir, el 42.7 % de la producción nacional. El 78 % de ese acero se obtuvo a través del proceso siderúrgico integral de horno alto y el 22 % restante en acerías eléctricas.

Cuenta con un total de 11 plantas industriales en el país, siendo la única que desarrolla el proceso integral de fabricación del acero la de Asturias (Gijón y Avilés). Estas plantas están dedicadas a las líneas de negocio de productos planos, productos largos y *downstream solutions*, que ofrece soluciones en acero a diversos sectores. Como comentamos, a estas plantas hay que añadir toda una red de distribución con 17 centros repartidos por toda la geografía española. En total, en España, ArcelorMittal emplea a 8605 personas.

ArcelorMittal también tiene presencia en I+D en España, con dos centros en Asturias, especializados en la innovación aplicada al proceso siderúrgico. Uno de ellos, el *Global R & D Asturias Centre*, cuenta con un campus de 12 000 m² repartidos en 10 edificios, y está focalizado en la investigación en energía, subproductos, inteligencia artificial o mecatrónica (véase [7]). Por otra parte, el *Global R & D New Frontier Centre*, se centra en proyectos de fabricación aditiva, nuevos materiales o factoría digital, que posteriormente son aplicados en las factorías de la compañía. Estos edificios se encuentran en Avilés, existiendo una planta industrial piloto en Gijón; además, existe otro centro en Sestao (País Vasco), que investiga el desarrollo

de nuevos productos y procesos.

Además de las instalaciones industriales e investigadoras, ArcelorMittal tiene en Madrid sus oficinas corporativas, donde se abordan cuestiones legales y económicas que incumben a la compañía en el Sur de Europa y Norte de África.

Capítulo 3

Descripción del problema físico

El problema planteado por ArcelorMittal se enmarca en el canal principal del horno alto, una vez que el acero líquido sale del horno propiamente dicho. Antes de centrarnos en el canal principal, es necesario adquirir una visión global sobre el proceso siderúrgico integral, basándonos en lo descrito en la propia web de la empresa [8] y en [9], para poder entender mejor los fenómenos físicos que tienen lugar.

3.1. Proceso siderúrgico integral

La primera etapa del proceso se centra en la producción del arrabio, del que posteriormente se obtendrá el acero, y que comienza con el tratamiento del mineral de hierro, la principal materia prima utilizada en el proceso siderúrgico integral. Se introduce en el horno alto el mineral de hierro, molido para que tenga un tamaño adecuado, junto con los fundentes (caliza), de forma que se aglomeren y tengan las dimensiones adecuadas para ser consumidos en el horno.

Además del mineral de hierro y los fundentes, también se introduce en el horno *cok metalúrgico*, que es carbón de cok destilado, un material duro, poroso y con una pureza en carbono mayor del 90 %. La unión de todos estos componentes en condiciones de alta temperatura da lugar a producto denominado *sínter*, obtenido a partir del proceso de sinterización, y que constituye la materia prima del proceso productivo en el horno alto.

En esta mezcla, cargada en el horno alto, la temperatura asciende gracias a la inyección de aire caliente a gran presión y 1200 °C por las toberas. De esta forma, el carbón actuará como combustible y reductor del oxígeno presente en el hierro, y los fundentes se encargarán de formar la escoria, que atrapa las impurezas del mineral de hierro.

En definitiva, en el horno alto se obtiene un material denominado *arrabio*, con una riqueza en hierro del 95 % y en carbono del 3.5 %. Entre los demás componentes, que conforman la *escoria*, destacan el silicio, el manganeso, el fósforo o el azufre; este último es muy nocivo para el acero, por lo que se minimizará su presencia añadiendo posteriormente carburo cálcico.

La obtención de acero depende de la cantidad de carbono presente en el producto. Se considera que, si el contenido en carbono es mayor del 1.7 %, tenemos fundición,

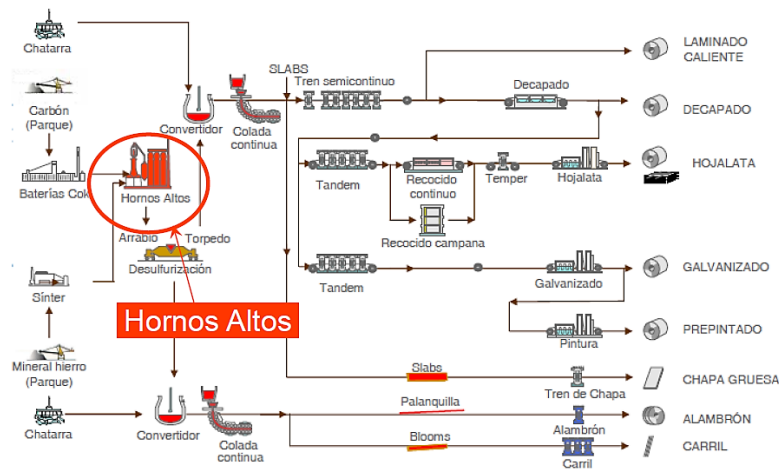


Figura 3.1: Proceso siderúrgico integral (imagen extraída de [7]).

donde se incluye el arrabio; para tener acero, la proporción de carbono ha de ser inferior a la comentada cifra. El acero presenta diversas ventajas respecto a la fundición: es resistente pero elástico, puede formar láminas e hilos y es capaz de absorber impactos. La fundición es más delicada, ya que es extremadamente dura pero quiebra fácilmente.

Por todo lo anterior, es interesante transformar el arrabio en acero, un subproceso que tiene lugar en los convertidores de las acerías, instalaciones encargadas de eliminar el exceso de carbono del arrabio empleando un soplado de oxígeno. Tras pasar por el convertidor, en la metalurgia secundaria de la acería se ajusta la composición del acero mediante la incorporación de gases y ferroaleaciones. Una visión esquemática del proceso siderúrgico integral puede verse en la Figura 3.1.

Posteriormente, el acero se solidifica en la colada continua, de forma que pasa a un molde para la elaboración de semiproductos, entre los cuales destacan: los desbastes de sección cuadrada (*blooms*), para carriles y perfiles, principalmente destinados a la construcción; los desbastes planos (*slabs*), para la fabricación de productos planos destinados a los sectores del automóvil y el electrodoméstico; y las palanquillas, para productos largos.

En nuestro problema, nos ocupamos en todo momento de la producción de acero en un horno alto, que supone en torno al 70 % del total mundial [9]. No obstante, también existe otro procedimiento de producción de acero muy común, a través de horno de arco eléctrico. En ese caso, la materia prima principal cargada en el horno eléctrico es chatarra (básicamente acero reciclado), de forma que se crea un arco voltaico entre dos electrodos sometidos a una diferencia de potencial y se funde la carga.

3.2. Canal principal del horno alto

El proceso global anteriormente descrito es continuo y sostenido en el tiempo, de forma que se repite periódicamente. El horno alto de la planta de Gijón tiene

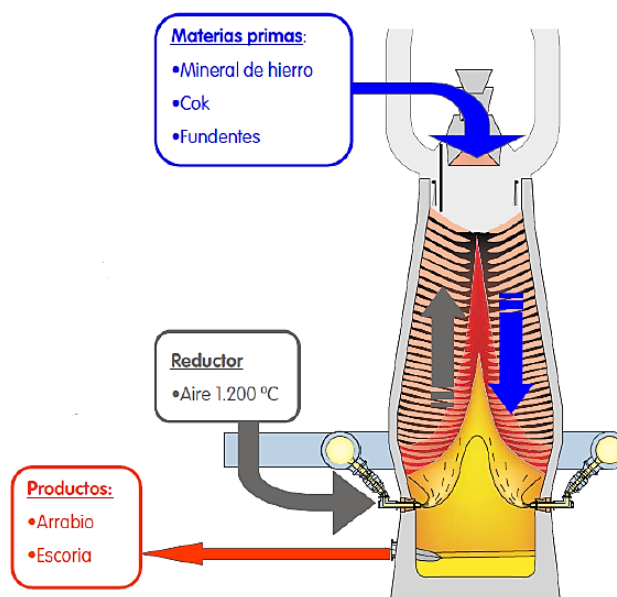


Figura 3.2: Esquema del horno alto (imagen extraída de [7]).

una altura de unos 40 m y un diámetro que no supera los 15 m, de forma que es una estructura bastante estilizada (un esquema de la misma puede verse en la Figura 3.2). Se trata de un reactor a contracorriente, es decir, las materias primas descienden desde la parte superior, en contraposición a las corrientes calientes de aire inyectadas desde la parte media-inferior del horno hacia arriba, a fin de sostener la mezcla y facilitar su combustión. La carga del horno va descendiendo y alcanza su temperatura de fusión, de forma que se dirige hacia la parte inferior del reactor (*crisol*) ya en estado líquido.

En el crisol del horno existen pequeñas piedras del carbón inicial muy resistentes, que se han visto poco alteradas, y entre las cuales se depositan el arrabio y la escoria en estado líquido. Esta colada de escoria y arrabio, a unos 1500 °C, saldrá del horno por un orificio denominado *piquera* (una vez taladrada la parte lateral inferior del mismo) y debido a la diferencia de presión entre el interior y el exterior. Este chorro cae a una estructura llamada *canal principal*, de unos 12 m de longitud y 1.5 m de ancho [1]. En ella han de reposar y luego separarse el arrabio y la escoria, debido a su diferente densidad, siendo la del primero 7 t/m³ y la de la segunda 2.6 t/m³.

Una vez que los líquidos están separados por diferencia de densidad, la escoria se filtra mediante un diente de arena y pasa a la ruta de la escoria (*slag runner*), y de ahí a un granulador, cantera o torpedo de escoria. Por su parte, el arrabio avanza hasta llegar al sifón (*skimmer*) y posteriormente por la ruta del arrabio (*iron runner*) hacia un balancín (*tilting runner*) y a las cucharas torpedo, que lo transportarán a la acería. Para información más pormenorizada puede consultarse [9]. El avance de los líquidos por el canal principal se representa de forma esquemática en la Figura 3.3.

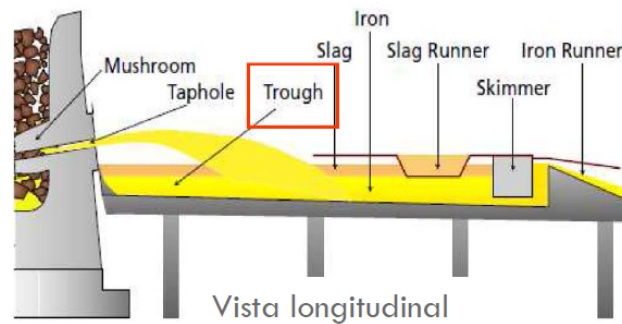


Figura 3.3: Vista longitudinal del canal principal del horno alto (imagen extraída de [2]).

El canal principal está compuesto de varias capas de hormigón refractario y una estructura exterior de acero (véase la Figura 3.4). En su parte superior, el canal cuenta con una capota que evita que la radiación emitida por la superficie libre de la escoria se transmita al exterior, manteniendo el calor en el interior. El exterior del canal está en contacto con el aire, facilitando así la refrigeración. Por otra parte, el aire con partículas de polvo indeseadas que hay sobre el canal y bajo la capota es aspirado por un sistema colocado entre el horno y la capota.

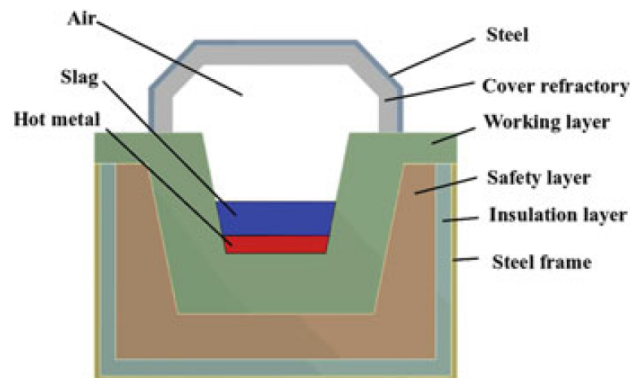


Figura 3.4: Vista transversal del canal principal del horno alto (imagen extraída de [4]).

El horno alto trabaja de forma continuada y únicamente se para cada cierto tiempo para operaciones de mantenimiento. No sucede esto con el proceso de colada de metal líquido, ya que cada ciclo en el canal principal dura aproximadamente una hora y media, hasta que por la piqueta taladrada en el horno empieza a salir gas. Cuando esto sucede, se sella la piqueta del horno con un tapón de antracita llamado *champiñón* durante media hora, para poder recuperar el nivel de líquidos; al restablecerse el nivel de líquidos en el crisol, se perfora el horno a través de la piqueta y se procede nuevamente al sangrado del metal fundido. Durante el tiempo de colada, teniendo en cuenta que el arrabio es menos viscoso que la escoria y circula a mayor velocidad, se cuelean típicamente 400 toneladas de arrabio y 150 de escoria (véase [1]). En los hornos altos que disponen de varias piquetas, el arrabio y

la escoria pueden circular por varios canales, de forma que el tiempo entre coladas es prácticamente nulo, ya que se va alternando la piquera en funcionamiento.

La erosión del canal, debida al paso de los metales líquidos a muy altas temperaturas, a su impacto mecánico y al ataque químico, hace necesaria la renovación del hormigón cada cierto período de tiempo. De hecho, la primera capa de hormigón (*capa de trabajo*) se cambia por una nueva cada dos meses de uso, aproximadamente, de cara a evitar la propagación del daño a las capas interiores.

Las elevadas temperaturas que se alcanzan en el canal principal complican la investigación experimental *in situ*, por eso la empresa pone mucho esfuerzo en la simulación numérica del problema. Por el momento, la empresa se había centrado en el estudio termohidrodinámico del canal principal, materializándose en varios TFM del Máster en Matemática Industrial. En el trabajo [1] se estudia el problema térmico estacionario y bidimensional, en [2] se lleva a cabo una aproximación a la modelización y simulación numérica del problema termohidrodinámico tridimensional en un dominio simétrico y en [3] se analiza el impacto mecánico del chorro de arrabio en el canal y la posible erosión que provoca.

Por tanto, el objetivo del problema es el estudio, modelización y simulación numérica del daño producido en el canal principal del horno alto, que podría dar lugar a la aparición de pequeñas grietas por donde se colaría el metal líquido, con las consecuencias catastróficas que ello tendría.

Capítulo 4

Análisis de los fenómenos a estudiar

Como se ha comentado en la descripción del problema, los principales fenómenos físico-químicos susceptibles de provocar daño al hormigón refractario del canal principal son el ataque químico y la erosión provocados por la escoria, así como el impacto termomecánico de la colada. La actuación de los diferentes fenómenos causantes de daño será más o menos perjudicial para el material en función de la composición del refractario, particularmente en el caso del ataque químico de la escoria. En este capítulo analizaremos la composición del hormigón refractario que conforma el canal principal del horno alto y los causantes del daño que se produce en dicho hormigón.

4.1. Composición del hormigón refractario del canal principal

Según [10], el hormigón del canal se enmarca dentro de los refractarios sin forma definida (*unshaped*) y moldeables (*castable*), ya que su apariencia se va definiendo a medida que avanza el proceso de construcción, sin pasar por una etapa previa de cocción o similares. Estos hormigones, de enlace hidráulico, pueden clasificarse atendiendo a diferentes características. Una posible división tiene en cuenta la presencia o no de agentes defloculantes, que posibilitan la existencia de pequeñas partículas en el refractario y reducen su contenido en agua. En caso afirmativo, los hormigones se subdividen según el porcentaje de CaO presente en el cemento del refractario (véase la Tabla 4.1).

Los hormigones refractarios utilizados en el canal principal buscan minimizar los contenidos en H_2O y CaO, por tanto los más empleados son LCC, ULCC y NCC. Estos materiales presentan buenas propiedades termomecánicas a elevadas temperaturas, ayudan a reducir los efectos corrosivos y abrasivos, son muy densos y escasamente porosos.

Aparte del contenido en CaO de los hormigones, los empleados en hornos altos están basados en el sistema ternario Al_2O_3 -SiC-C, de modo que la cantidad de

Categoría	Mínimo % CaO	Máximo % CaO
<i>Medium-cement castable</i> (MCC)	> 2.5	—
<i>Low-cement castable</i> (LCC)	> 1.0	< 2.5
<i>Ultralow-cement castable</i> (ULCC)	> 0.2	< 1.0
<i>No-cement castable</i> (NCC)	0	< 0.2

Tabla 4.1: Tipos de hormigón refractario defloculado según su contenido en CaO (Capítulo 11 de [10]).

cada uno de estos componentes confiere distintas características al refractario, como podemos ver en la Tabla 4.2.

Componente	%	Fuente	Propiedades
Al ₂ O ₃	73	Bauxita calcinada Alúmina fundida	Mayor refractariedad
SiC	20	Arenas o cuarzo de alta pureza Coque de petróleo	Mayor resistencia a la erosión Mejoría frente al ataque de la escoria
C	4	Brea Resina Coque Negro de humo Grafito	Mayor conductividad térmica Mayor resistencia a la corrosión Mejor resistencia térmica

Tabla 4.2: Composición típica y propiedades del hormigón refractario utilizado en hornos altos [1].

4.2. Ataque químico y erosivo de la escoria

En esta sección, veremos cómo los distintos componentes del hormigón reaccionan químicamente con los de la escoria, produciéndose de esa forma daño en el canal principal del horno alto.

En relación al ataque químico de la escoria se seguirán principalmente las referencias [1, 9]. La escoria se forma a partir de las gangas de los minerales, las cenizas de cok, fundentes y componentes reductores presentes en el horno alto. Está compuesta principalmente por CaO, SiO₂, Al₂O₃ y MgO, y, en menor medida, contiene manganeso, azufre, titanio, potasio, sodio y fósforo. La composición típica del arrabio y la escoria vertidos al canal principal, a una temperatura próxima a 1500 °C, puede verse en la Tabla 4.3.

Escoria	%	Arrabio	%
CaO	40	Fe	94.5
SiO ₂	36	C	4.5
Al ₂ O ₃	10	Si	0.4
MgO	10	Mn	0.3
Otros (FeO, S...)	4	Otros (S, P...)	0.3

Tabla 4.3: Composición típica de la escoria y el arrabio [9].

Una magnitud relevante a la hora de caracterizar la escoria es el grado de *basicidad*. Cuanto menor es el valor de la basicidad, la escoria es más ácida; recíprocamente, para valores pequeños, la escoria es básica. En [9] se dan hasta tres definiciones alternativas para la basicidad, B_1 , B_2 y B_3 :

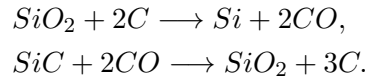
$$B_1 = \frac{\%CaO}{\%SiO_2}, \quad B_2 = \frac{\%CaO + \%MgO}{\%SiO_2}, \quad B_3 = \frac{\%CaO + \%MgO}{\%SiO_2 + \%Al_2O_3}.$$

La temperatura de fusión de la escoria es superior a la que puede tener el arrabio, por eso cuando se encuentra a temperaturas inferiores a las alcanzadas en estado líquido puede presentar cristales sólidos en su composición, que incrementan la viscosidad de la escoria. De hecho, más allá de su basicidad o del contenido en los componentes citados con anterioridad, la principal dependencia de la viscosidad de la escoria es con la temperatura.

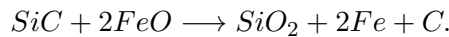
El contacto de la escoria con el hormigón refractario del canal principal da lugar a una serie de reacciones químicas que producen desgaste en este último, a pesar de sus buenas propiedades, produciéndose el *ataque químico*.

Por un lado, se producen reacciones de oxidación entre las burbujas de oxígeno y aire presentes en el canal y la pared del refractario:

- Oxidación directa de componentes carbonosos (C) del refractario.
- Oxidación de SiC (refractario) con CO, producido a partir de la reacción entre SiO₂ (escoria) y C (arrabio):



- Oxidación de SiC (refractario) con FeO (escoria):



Por otra parte, la escoria penetra por los poros de la capa externa de hormigón, de manera tal que el óxido de calcio, el óxido ferroso y el óxido de magnesio reaccionan con la alúmina y el carburo de silicio del refractario. Algunas de estas reacciones hacen disminuir la capacidad refractaria del hormigón y dan lugar a posibles mecanismos de corrosión. Además, algunos de los componentes de la escoria también reaccionan entre sí, formándose productos de bajo punto de fusión (hercinita, gehlenita, anortita) que podrían reaccionar nuevamente con el hormigón.

Además de reaccionar químicamente con el hormigón, el rozamiento del flujo de escoria con las paredes del canal principal también puede dar lugar a un fenómeno de *erosión* en dicho canal. Existen dos factores principales a la hora de determinar el grado de erosión provocado: la velocidad y la temperatura de la colada; de hecho, el desgaste sufrido por el refractario será mayor tanto mayor sean estas dos magnitudes. Para mitigar esta erosión, cabría pensar en la posibilidad de reducir el volumen de escoria producido por unidad de tiempo, o bien en aumentar la sección del canal, algo poco factible *a priori*.

4.3. Impacto térmico de la colada

Como hemos comentado, la temperatura que se alcanza en el canal principal durante el proceso de colada llega a alcanzar los 1500 °C. El problema surge durante las paradas que se realizan para recuperar el nivel de líquido en el horno alto, cuando se taponan la piquera, de forma que la temperatura en la ruta principal desciende brusca y considerablemente. Este acusado descenso provoca contracciones en el hormigón (así como dilataciones al colar material nuevamente), con el consecuente aumento de las tensiones internas del material y, al acumularse muchos ciclos de colada, del daño sobre el refractario, que se podría transformar en grietas y fisuras de consideración. Este impacto térmico podría mitigarse reduciendo el número de coladas, a la par que aumentando la duración de cada una de ellas, para que así tengan lugar menos transiciones bruscas de temperatura.

Además, también se produce impacto térmico la primera vez que se vierte la mezcla líquida sobre el canal principal. Para reducir este impacto térmico inicial, antes de la primera colada, se precalienta la estructura de hormigón con mecheros, de forma que el salto térmico entre la temperatura de referencia del canal y la temperatura de los fluidos sea menor. En caso de no precalentar el canal, el salto térmico se produciría respecto a la temperatura ambiente y el daño sobre el hormigón aumentaría considerablemente.

Es importante notar que, después de verter los líquidos sobre el canal, las observaciones experimentales y las simulaciones numéricas conocidas en la literatura indican que la temperatura en los componentes sólidos del canal principal alcanza un estado estacionario. Por otro lado, las necesidades computacionales necesarias para realizar la simulación numérica del problema termohidrodinámico evolutivo hacen en este momento que su resolución sea inabordable.

Por tanto, en este trabajo consideramos el daño producido en el canal, desde que este se encuentra a la temperatura de referencia, debida al precalentamiento, hasta que se alcanza la distribución estacionaria de temperaturas. Estas temperaturas proceden de la resolución del problema termohidrodinámico llevada a cabo en [4]. Volveremos sobre esta cuestión en el Capítulo 6.

4.4. Impacto mecánico de la colada

Una vez comienza el proceso de colada del arrabio y la escoria desde el horno alto hacia el canal principal, el chorro de material líquido saliente del horno alto impacta contra el refractario (véase la Figura 3.3) desde una altura nada desdeñable, y a una velocidad típica de unos 6 m/s. Dado el carácter cíclico con que el chorro de metal líquido incide sobre el canal principal, se piensa que el primero de los impactos es el que más daño puede causar a los refractarios. Esto es así porque el primer impacto se produce contra hormigón seco, y no así los siguientes, que se ven amortiguados por la capa de fluidos ya presente en el canal.

Estas y otras consideraciones se detallan en [4], donde también se analiza el perfil de tensiones en el canal principal en diferentes instantes de tiempo después del inicio del chorro, que se lanza teniendo en cuenta la inclinación de 10° de la piquera respecto de la horizontal. En un primer momento, la mayor concentración

de tensiones se produce en cierto punto del canal, atenuándose rápidamente debido al amortiguamiento de la capa de líquidos que se van formando. A partir de un cierto instante, el perfil de tensión se vuelve prácticamente estacionario, con un mínimo situado cerca de la posición del impacto inicial y dos máximos casi simétricos muy próximos a él, uno a cada lado. En caso de que el chorro inicial saliese del orificio paralelo al canal, cabría esperar que la posición del mínimo fuese la misma del impacto inicial y que los máximos fuesen simétricos.

Por tanto, el impacto del chorro, además de pequeños desprendimientos del revestimiento de hormigón, provoca un aumento de las tensiones internas del material, potencial causa de aparición de daños en él a lo largo de los diferentes ciclos de carga, con la consecuente aparición de fisuras y grietas. Este impacto mecánico podría mitigarse reduciendo el número de coladas, a la par que aumentando la duración de cada una de ellas.

En resumen, teniendo en cuenta todo lo anteriormente comentado, existen una serie de variables físico-químicas que, en última instancia, provocan un daño sobre el material proporcional a la magnitud de estas: la temperatura de la colada, la velocidad de la escoria, la velocidad de la colada (del chorro) y la concentración de ciertos compuestos químicos reactivos en la escoria.

4.5. Propiedades de los materiales

Como ya comentamos en la descripción del problema físico (Sección 3.2), el canal principal está compuesto por varias capas de hormigón refractario, un recubrimiento de acero y una cubierta refractaria. Los valores de conductividad térmica (κ), calor específico (c_p) y densidad (ρ) proporcionados por la compañía ArcelorMittal se recogen en la siguiente tabla:

Material	κ (W m ⁻¹ K ⁻¹)	c_p (J kg ⁻¹ K ⁻¹)	ρ (kg m ⁻³)
Capa de trabajo	2.60	1212	2500
Capa de seguridad	1.80	1172	2900
Capa de aislamiento	0.14	1050	480
Cubierta	1.00	—	1950
Acero	54.00	465	7863

Tabla 4.4: Propiedades de los materiales sólidos.

Por otro lado, los diferentes fluidos que componen el flujo multifásico, supuestos como incompresibles e inmiscibles, tienen las propiedades siguientes (μ es la viscosidad dinámica):

Material	κ (W m ⁻¹ K ⁻¹)	c_p (J kg ⁻¹ K ⁻¹)	ρ (kg m ⁻³)	μ (Pa s)
Metal	16.50	850	7015.00	7.15×10^{-3}
Escoria	9.70	807	2600.00	0.50
Aire	2.57×10^{-2}	1005	1.21	1.82×10^{-5}

Tabla 4.5: Propiedades de los materiales fluidos.

Las propiedades recogidas en las Tablas 4.4 y 4.5 son utilizadas en la simulación termohidrodinámica del canal (véase [4]). La empresa todavía no dispone de mediciones acerca de los parámetros mecánicos para cada uno de los materiales. Volveremos sobre esta cuestión en la Sección 7.4.2.

Capítulo 5

Modelización matemática del daño en el hormigón

5.1. Introducción

El hormigón es un material compuesto, conformado por gránulos incrustados en una matriz microporosa de cemento hidratado. Los elementos granulares se encargan de mitigar las variaciones de volumen en el material (contracción y dilatación), mientras que el cemento se ocupa de la adhesión de los diversos constituyentes del hormigón. En la interfaz entre los gránulos y la matriz, la cristalización del cemento hidratado es diferente en relación con el resto del material, y la porosidad es mayor que en ningún otro lugar. Esto puede propiciar la decohesión de los diferentes constituyentes del hormigón, suponiendo la principal causa inicial de aparición de daño en el material. En particular, las mayores concentraciones de tensiones (preludio de aparición de microfracturas) se dan en torno a los gránulos de mayor tamaño, siendo estas las zonas de mayor fragilidad del material [11]. Es importante resaltar que la resistencia del hormigón a esfuerzos de compresión es mucho mayor (más de 10 veces, según [12]) que en tracción, de ahí su uso habitual en compresión.

El hormigón refractario empleado en el canal principal del alto horno es mucho menos poroso que el convencional. Además, se somete a un proceso especial de secado para evitar la hidratación, que supondría un problema a temperaturas tan elevadas. Por tanto, en la modelización no se tendrán en cuenta la porosidad del material ni el comportamiento debido a procesos de hidratación y secado.

Los mecanismos que dan lugar al deterioro de un material, en particular del hormigón, se manifiestan de forma diferente según la escala de observación. A nivel microscópico, se aprecia una acumulación de microtensiones en la vecindad de la frontera entre los componentes del hormigón; en la mesoescala (a nivel de un elemento de volumen representativo del material) se aprecian el crecimiento y la coalescencia de microgrietas, que, una vez unidas, darán lugar a la iniciación de una grieta; a nivel macroscópico se observa el crecimiento de la grieta en cuestión. El estudio de estos mecanismos, en la microescala y la mesoescala, puede llevarse a cabo a través de una disciplina propia de la Mecánica de Sólidos: la Mecánica del Daño. A nivel macroscópico, el estudio de la propagación de grietas suele abordarse

desde la Mecánica de la Fractura.

Las deformaciones plásticas del hormigón en la mesoescala no son medibles hasta que el material entra en régimen de fractura. No obstante, en la microescala el daño es un fenómeno localizado, de modo que pueden existir deformaciones plásticas en regiones dañadas muy pequeñas (véase [13], Sección 3.2). Siguiendo los trabajos de Lemaitre [12, 13], en la modelización del daño se considerará que estas microdeformaciones permanentes son despreciables, de forma que el modelo de daño tendrá en cuenta, a lo sumo, deformaciones elásticas y térmicas.

5.2. Modelización matemática del daño

En esta sección veremos cómo podemos representar en términos mecánicos y matemáticos la idea intuitiva de daño en el material, basándonos en los razonamientos incluidos en [13]. Consideremos un elemento de volumen representativo del material dañado en la mesoescala, en el entorno de un punto M . El concepto de daño está ligado, a nivel microscópico, a la aparición de microsuperficies de discontinuidades, que se manifiestan en la mesoescala como superficies dañadas en cada plano del material. De esta forma, el daño mecánico asociado a ese elemento de volumen representativo dependería del plano considerado, tanto de su orientación como de su distancia a M . Consideremos, entonces, en el volumen de control, un plano asociado orientado por su vector normal \vec{n} a distancia x de M en esa dirección normal. A raíz de esta idea, definimos el área δS de intersección del plano con el elemento de volumen representativo. Por otra parte, sea δS_{Dx} el área efectiva de todas las microgrietas contenidas en δS (ver Figura 5.1). Se define la *variable interna de daño*, $D(M, \vec{n}, x)$, asociada al punto M en la dirección \vec{n} y en la abscisa x , como:

$$D(M, \vec{n}, x) = \frac{\delta S_{Dx}}{\delta S}. \quad (5.1)$$

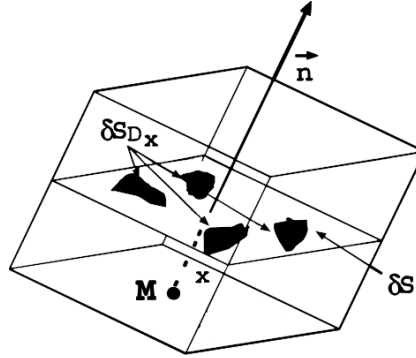


Figura 5.1: Visualización del daño en un elemento de volumen representativo (imagen de [14]).

Con intención de definir una variable de daño continua sobre cada elemento de volumen representativo, del conjunto de planos a distancia variable x del punto M , todos ellos orientados según \vec{n} , nos quedamos con el que tenga una variable de

daño más grande, de forma que se define:

$$D(M, \vec{n}) = \max_{(x)} [D(M, \vec{n}, x)] = \frac{\delta S_D}{\delta S}. \quad (5.2)$$

5.2.1. Daño isótropo unidimensional

Si se considera un caso unidimensional simple, con una distribución de microdefectos homogénea a lo largo de la dirección del elemento dañado, como en la Figura 5.2, la variable de daño también será homogénea e isótropa. Por tanto, la interpretación de la variable D se simplifica, ya que es constante en cada elemento de volumen representativo y se define como una densidad superficial efectiva de microdefectos:

$$D = \frac{S_D}{S}, \quad (5.3)$$

de forma que $0 \leq D \leq 1$, siendo $D = 0$ en un elemento de volumen sin daño y $D = 1$ si se produce la ruptura del material en esa zona. En general, el fallo del material tiene lugar físicamente para un valor crítico $D_c < 1$.

Concepto de tensión efectiva

Supongamos ahora que la probeta de la Figura 5.2 se somete a un test de tracción uniaxial, es decir, a una fuerza de módulo F en su dirección normal, de forma que la tensión uniaxial, σ , sobre una superficie de área S , es:

$$\sigma = \frac{F}{S}. \quad (5.4)$$

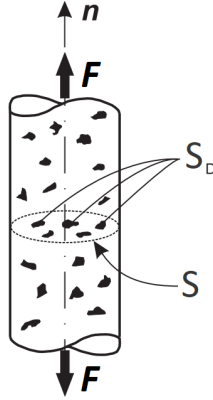


Figura 5.2: Elemento dañado sometido a tensión uniaxial a través de una fuerza $\vec{F} = F\vec{n}$ (los vectores se indican en negrita en la imagen, extraída de [15]).

Si el material está dañado ($S_D > 0$) la fuerza \vec{F} actúa de forma efectiva sobre una superficie $S - S_D$, menor que la original. Por tanto, es razonable definir una *tensión efectiva*, $\tilde{\sigma}$, relativa a la superficie que efectivamente resiste la carga:

$$\tilde{\sigma} = \frac{F}{S - S_D}. \quad (5.5)$$

A partir de las igualdades (5.3), (5.4) y (5.5) se puede establecer la relación existente entre las tensiones σ y $\tilde{\sigma}$:

$$\tilde{\sigma} = \frac{F}{S - S_D} = \frac{F/S}{1 - S_D/S} \Rightarrow \boxed{\tilde{\sigma} = \frac{\sigma}{1 - D}}. \quad (5.6)$$

Estrictamente, esta es la tensión efectiva de un material dañado sometido a tracción, que verifica en todo momento $\tilde{\sigma} \geq \sigma$, cumpliéndose la igualdad para un material virgen, es decir, $\tilde{\sigma} = \sigma$ si $D = 0$. Además, cuando se va a producir la fractura del material se verifica que $\tilde{\sigma} \rightarrow \infty$, dado que $D \rightarrow 1$.

En un proceso de carga cíclica, que incluya de forma continuada esfuerzos a tracción y a compresión, las grietas del material podrían cerrarse al ser este sometido a compresión, en lo que se conoce como *efecto unilateral* del hormigón. En ese caso, la definición de la tensión efectiva (5.6) pasaría a ser válida solamente para esfuerzos de tracción. Si todas las grietas se cerrasen, la superficie efectiva $S - S_D$ en compresión sería igual a la superficie original, y la tensión efectiva en compresión sería igual a la tensión real en compresión. De esta forma, la variable de daño no se vería alterada por el cierre de las grietas (véase [13], Sección 2.3.4). En este trabajo no se considera el posible cierre de las grietas, de modo que la definición de tensión efectiva (5.6) es válida también para esfuerzos compresivos.

Principio de equivalencia de las deformaciones

A continuación veremos cómo se modifican las ecuaciones constitutivas del material en una zona dañada. Bajo consideraciones termodinámicas, se asume que el estado termomecánico en cada punto (microscópico) del material está completamente definido por los valores temporales de un conjunto de variables de estado, que dependen del punto en consideración. Extrapolando a la mesoescala, las relaciones constitutivas para las deformaciones en un elemento de volumen no dañado no se verán modificadas por un elemento de volumen vecino donde existan microfracturas (daño), de forma que se puede establecer el *Principio de equivalencia de las deformaciones* (Sección 1.2.3 en [13]): “La deformación asociada a un estado dañado bajo una tensión aplicada σ es equivalente a la deformación asociada con el estado no dañado sometido a una tensión efectiva $\tilde{\sigma}$ ”. Es decir, equivalentemente: “Toda ecuación constitutiva para un material dañado puede derivarse de igual forma que para un material virgen, reemplazando la tensión habitual por la tensión efectiva”. En la Figura 5.3 se expresa este principio de forma gráfica.

En el caso elástico lineal unidimensional, para un material no dañado, la ley de Hooke establece:

$$\sigma = E\varepsilon^e, \quad (5.7)$$

siendo σ la tensión, ε^e la deformación elástica y E el módulo de Young del material.

Por tanto, según el *Principio de equivalencia de las deformaciones*, para obtener la ley de comportamiento en un material dañado basta con sustituir σ por $\tilde{\sigma}$ en (5.7):

$$\tilde{\sigma} = \frac{\sigma}{1 - D} = E\varepsilon^e \Rightarrow \boxed{\sigma = (1 - D)E\varepsilon^e}. \quad (5.8)$$

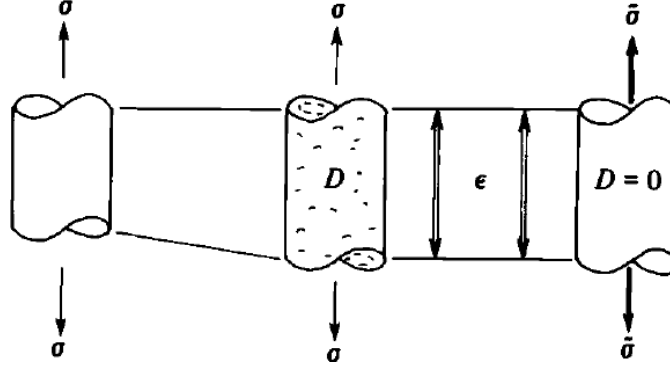


Figura 5.3: Según el *Principio de equivalencia de las deformaciones*, la deformación asociada al material dañado, con tensión aplicada σ , es igual a la asociada al material equivalente no dañado, con tensión efectiva $\tilde{\sigma}$ (imagen de [12]).

La relación (5.8) se puede interpretar como una reducción de la rigidez del material, representada por el módulo de Young, de forma proporcional al daño. Por analogía con el concepto de tensión efectiva puede definirse un módulo de Young efectivo, \tilde{E} :

$$\tilde{E} = (1 - D)E, \quad (5.9)$$

que es menor que el módulo de Young original, poniendo de manifiesto la pérdida de rigidez del material a consecuencia del daño.

5.2.2. Daño isótropo tridimensional

La motivación utilizada para establecer el *Principio de equivalencia de las deformaciones* caracterizaba la deformación como una variable de estado. Esta es la clave para proceder a la generalización de los conceptos y relaciones tratadas con anterioridad, que se ha de realizar en el marco de la *Termodinámica de los Procesos Irreversibles*, teoría que identifica cada fenómeno físico a analizar con una variable de estado. En nuestra modelización matemática tridimensional entrarán en juego las siguientes variables de estado:

- el *tensor de deformaciones*, ε , asociado con el *tensor de tensiones*, σ , y relacionado con el vector de desplazamientos, \vec{u} , de la siguiente forma:

$$\varepsilon(\vec{u}) = \frac{1}{2} (\nabla \vec{u} + \nabla \vec{u}^t), \quad (5.10)$$

donde $\nabla \vec{u}^t$ denota la matriz traspuesta de $\nabla \vec{u}$,

- la *temperatura*, θ , tiene como variable asociada la *entropía específica*, s ,
- la variable de *daño*, D , asociada a la *tasa de liberación de energía de deformación debida al daño*, Y . En [12,13] se toma como variable asociada al daño $-Y$, aunque posteriormente la interpretación física se realiza sobre Y , por lo que en este trabajo hemos elegido Y como variable asociada al daño desde el comienzo.

La definición de daño dada en (5.3) se ha aplicado con anterioridad a un caso de tensión uniaxial, de forma que se pudo establecer el concepto de tensión efectiva unidimensional. Según la relación (5.2), la variable de daño tridimensional dependería del plano y del punto en el que fuese calculada, pero si se considera que el daño es isótropo, tendría el mismo valor en todas las direcciones dentro del elemento de volumen. Por tanto, la definición (5.3) continúa caracterizando completamente el estado de daño tridimensional en cada elemento de volumen representativo (véase [13], Sección 2.1.1). A raíz de esta hipótesis, se puede generalizar el concepto de *tensión efectiva* al caso tridimensional, de forma que:

$$\tilde{\sigma} = \frac{\sigma}{1 - D}. \quad (5.11)$$

Con la generalización del concepto de tensión efectiva, también es válido el *Principio de equivalencia de las deformaciones*. Por ende, lo que en el caso unidimensional era la pérdida de rigidez del material a través del módulo de Young, ahora se convierte en pérdida de rigidez a través del *tensor de elasticidad con daño*, Λ_D :

$$\Lambda_D = (1 - D)\Lambda, \quad (5.12)$$

donde Λ es el tensor de elasticidad (de cuarto orden) en el estado no dañado.

A continuación, veremos cómo se formulan las ecuaciones que modelan la termoelasticidad lineal con daño isótropo. Para ello seguiremos básicamente el procedimiento llevado a cabo en la Sección 7.3.2 de [12]. Es importante subrayar que la ley elástica a considerar puede no ser isótropa, como sí lo es el daño, de forma que la derivación matemática tendrá carácter general en ese sentido, aunque luego sí se particularizará al caso de elasticidad isótropa.

Las relaciones entre las variables de estado y sus variables asociadas se establecen a partir de un potencial termodinámico, denominado *energía libre de Helmholtz*, ψ . Matemáticamente, por cuestiones de estabilidad termodinámica (véase [12], Sección 2.4.2), esta es una función escalar continua, cóncava con la temperatura y convexa con las demás variables de estado, ϵ y D , y que se anula al ser evaluada en el estado de referencia ($\epsilon = \mathbf{0}, \theta = \theta_0, D = 0$). Por tanto, para un problema termoelástico con daño isótropo, la energía libre de Helmholtz tiene la siguiente dependencia:

$$\psi = \psi(\epsilon, \theta, D). \quad (5.13)$$

A partir del *Segundo Principio de la Termodinámica*, se pueden establecer las *leyes de estado* siguientes (véase [13], Sección 2.1.1):

$$\sigma = \rho \frac{\partial \psi}{\partial \epsilon} \quad (5.14)$$

$$s = - \frac{\partial \psi}{\partial \theta} \quad (5.15)$$

$$Y = - \rho \frac{\partial \psi}{\partial D} \quad (5.16)$$

De cara a elegir una expresión adecuada para la energía libre de Helmholtz (por unidad de volumen), ψ , vamos a considerar las siguientes hipótesis:

- Pequeñas deformaciones y desplazamientos.
- Variaciones de temperatura pequeñas respecto a la temperatura de referencia.
- Las relaciones a obtener para la termoelasticidad lineal con daño, particularizadas al caso no dañado ($D = 0$), han de coincidir con resultados ya establecidos en la termoelasticidad lineal sin daño.
- No se considera daño termoquímico.

Teniendo esto en cuenta¹, la energía libre de Helmholtz, ψ , para termoelasticidad lineal (no necesariamente isótropa), ha de tomar la forma siguiente (véase [12]):

$$\rho\psi(\boldsymbol{\varepsilon}, \theta, D) = \frac{1}{2}(1-D)\boldsymbol{\Lambda} : [\boldsymbol{\varepsilon} - \boldsymbol{\alpha}(\theta - \theta_0)] : [\boldsymbol{\varepsilon} - \boldsymbol{\alpha}(\theta - \theta_0)] + C(\theta - \theta_0)^2, \quad (5.17)$$

siendo:

- ρ la *densidad de masa* (constante),
- $\boldsymbol{\alpha}$ el tensor de expansión térmica a tensión constante (de segundo orden),
- θ_0 la *temperatura de referencia*,
- C una constante a determinar, independiente del daño.

Ley de comportamiento termoelástica lineal isótropa con daño isótropo

Partiendo de (5.17) y utilizando la ecuación (5.14), se puede calcular la relación constitutiva tensión-deformación:

$$\boldsymbol{\sigma} = \rho \frac{\partial \psi}{\partial \boldsymbol{\varepsilon}} = (1-D)\boldsymbol{\Lambda} : [\boldsymbol{\varepsilon} - \boldsymbol{\alpha}(\theta - \theta_0)], \quad (5.18)$$

donde se ha utilizado el hecho de que $\boldsymbol{\Lambda}$ y $\boldsymbol{\alpha}$ son independientes de las deformaciones.

Esta ley constitutiva también puede escribirse poniendo $\boldsymbol{\varepsilon}$ en función de $\boldsymbol{\sigma}$. Para ello, basta tener en cuenta que el tensor de deformaciones, $\boldsymbol{\varepsilon}$, puede descomponerse de la siguiente forma:

$$\boldsymbol{\varepsilon} = \boldsymbol{\varepsilon}^e + \boldsymbol{\varepsilon}^{th}, \quad (5.19)$$

donde el *tensor de deformaciones elásticas*, $\boldsymbol{\varepsilon}^e$, viene dado por:

$$\boldsymbol{\varepsilon}^e = \boldsymbol{\Lambda}^{-1} : \frac{\boldsymbol{\sigma}}{1-D}, \quad (5.20)$$

y el *tensor de deformaciones térmicas*, $\boldsymbol{\varepsilon}^{th}$, por:

$$\boldsymbol{\varepsilon}^{th} = \boldsymbol{\alpha}(\theta - \theta_0). \quad (5.21)$$

¹En lo que sigue, se utilizará el convenio de suma sobre índices repetidos para tensores. Además, si \boldsymbol{S} y \boldsymbol{T} son dos tensores de orden arbitrario, se denota la contracción de los dos últimos índices de \boldsymbol{S} con los dos primeros índices de \boldsymbol{T} como $\boldsymbol{S} : \boldsymbol{T}$. Por ejemplo, si \boldsymbol{S} es un tensor de orden 4 y \boldsymbol{T} un tensor de orden 2, se tiene $\boldsymbol{S} : \boldsymbol{T} = S_{ijkl}T_{kl} = \sum_{k=1}^3 \sum_{l=1}^3 S_{ijkl}T_{kl}$.

De este modo, utilizando las ecuaciones (5.12), (5.19) y (5.21), la ecuación (5.18) puede reescribirse fácilmente como:

$$\boldsymbol{\sigma} = \boldsymbol{\Lambda}_D : \boldsymbol{\varepsilon}^e, \quad (5.22)$$

que es la expresión que cabría esperar por analogía con el caso unidimensional (véanse (5.8) y (5.9)), una vez generalizados los conceptos de tensión efectiva y equivalencia de las deformaciones.

Además, utilizando (5.19)–(5.21), se tiene:

$$\boldsymbol{\varepsilon} = \boldsymbol{\varepsilon}^e + \boldsymbol{\varepsilon}^{th} = \boldsymbol{\Lambda}^{-1} : \frac{\boldsymbol{\sigma}}{1-D} + \boldsymbol{\alpha}(\theta - \theta_0). \quad (5.23)$$

En el caso de elasticidad homogénea e isotrópica, la relación (5.20) para $D = 0$ se reduce a la conocida expresión de la ley de Hooke. En cuanto a (5.21), en un material isotrópico la deformación térmica es un tensor esférico que depende únicamente de un escalar α , el coeficiente de expansión térmica a tensión constante. Es decir, en el caso isotrópico sin daño tenemos las siguientes relaciones (véase [16]):

$$\Lambda_{ijkl} = \frac{E}{2(1+\nu)(1-2\nu)} [2\nu\delta_{ij}\delta_{kl} + (1-2\nu)(\delta_{ik}\delta_{jl} + \delta_{il}\delta_{jk})], \quad (5.24)$$

$$\alpha_{ij} = \alpha\delta_{ij}, \quad (5.25)$$

siendo E el módulo de Young y ν el coeficiente de Poisson.

Teniendo esto en cuenta, la ley de termoelasticidad lineal isotrópica tridimensional acoplada con daño isotrópico (5.23) se puede expresar como (véase [12], Sección 4.2):

$$\boldsymbol{\varepsilon} = \frac{1+\nu}{E} \frac{\boldsymbol{\sigma}}{1-D} - \frac{\nu}{E} \frac{\text{tr}(\boldsymbol{\sigma})}{1-D} \mathbf{I} + \alpha(\theta - \theta_0) \mathbf{I}, \quad (5.26)$$

donde \mathbf{I} denota el tensor identidad de orden 2.

Si invertimos la relación tensión–deformación (5.26) tenemos:

$$\boldsymbol{\sigma} = \frac{(1-D)E}{(1+\nu)(1-2\nu)} [\nu \text{tr}(\boldsymbol{\varepsilon}) \mathbf{I} + (1-2\nu)\boldsymbol{\varepsilon} - \alpha(\theta - \theta_0)(1+\nu) \mathbf{I}]. \quad (5.27)$$

Cálculo de la entropía

A continuación, a partir de (5.15) y (5.17), podemos obtener la expresión para la entropía, s :

$$s = -\frac{\partial \Psi}{\partial \theta} = \frac{(1-D)}{\rho} \boldsymbol{\Lambda} : [\boldsymbol{\varepsilon} - \boldsymbol{\alpha}(\theta - \theta_0)] : \boldsymbol{\alpha} - \frac{2C}{\rho} (\theta - \theta_0). \quad (5.28)$$

Podemos particularizar (5.28) para el caso de termoelasticidad isotrópica, empleando para ello (5.24) y (5.25), de forma que:

$$s = \frac{E\alpha(1-D)}{\rho(1-2\nu)} [\text{tr}(\boldsymbol{\varepsilon}) - 3\alpha(\theta - \theta_0)] - \frac{2C}{\rho} (\theta - \theta_0). \quad (5.29)$$

La interpretación de la constante C , introducida por [12] en el potencial de Helmholtz, no se especifica en dicha referencia. Por otro lado, de forma independiente, en ese mismo libro se lleva a cabo la formulación matemática correspondiente a la termoelasticidad isótropa sin daño (Sección 4.2). Por tanto, evaluando la expresión (5.29) en $D = 0$, podemos compararla con la correspondiente expresión recogida en [12] y así determinar C . Es decir, en virtud de la formulación termoelástica isótropa en ausencia de daño, vamos a determinar el parámetro C de la definición de la energía libre de Helmholtz en la teoría termoelástica isótropa con daño.

La expresión dada por [12] para termoelasticidad isótropa sin daño es:

$$s = \frac{E\alpha}{\rho(1-2\nu)} \text{tr}(\boldsymbol{\varepsilon}) + \frac{C_E}{\theta_0} (\theta - \theta_0), \quad (5.30)$$

donde C_E es el calor específico (por unidad de masa) a deformación constante.

Por comparación de las expresiones (5.29), con $D = 0$, y (5.30), se tiene:

$$C = -\frac{1}{2} \left[\frac{\rho C_E}{\theta_0} + \frac{3E\alpha^2}{1-2\nu} \right]. \quad (5.31)$$

Finalmente, introduciendo la relación (5.31) en (5.29), obtenemos la siguiente expresión de la entropía para termoelasticidad lineal con daño:

$$s = \frac{E\alpha(1-D)}{\rho(1-2\nu)} \text{tr}(\boldsymbol{\varepsilon}) + \left[\frac{3\alpha^2 ED}{\rho(1-2\nu)} + \frac{C_E}{\theta_0} \right] (\theta - \theta_0). \quad (5.32)$$

Ley de conservación de la energía

Una vez hemos derivado la correcta expresión para la entropía, vamos a centrar nuestros esfuerzos en el desarrollo de la ecuación de conservación de la energía, equivalente al *Primer Principio de la Termodinámica*. La ecuación completa (en ausencia de deformaciones plásticas) viene dada por (véase [12], Sección 2.5.2):

$$-\text{Div}(\vec{q}) = \rho C_E \dot{\theta} - Y \dot{D} - \theta \frac{\partial \boldsymbol{\sigma}}{\partial \theta} : \dot{\boldsymbol{\varepsilon}} + \frac{\partial Y}{\partial \theta} \dot{D}, \quad (5.33)$$

donde \vec{q} es el flujo de calor. En la ecuación de balance se ha asumido que no existen fuentes de calor internas en el sólido, por lo que se omite ese término.

En primer lugar, en el caso isótropo, la relación entre el flujo de calor y el gradiente de temperatura viene dada por la ley de Fourier, que da cuenta de la conducción térmica:

$$\vec{q} = -\kappa \nabla \theta, \quad (5.34)$$

donde κ es la conductividad térmica, que es positiva y asumimos que no depende del daño. Las propiedades térmicas del material, como la conductividad, podrían verse afectadas por la variable de daño, como lo hace el módulo de Young con la variable de daño elástico, pero en este trabajo no se considera esa posibilidad. Más adelante veremos que, en el caso del canal, la conductividad térmica será una función constante a trozos, puesto que su valor varía entre los diferentes materiales que conforman el canal principal.

La relación (5.33) se simplifica notablemente al tener en cuenta ciertas hipótesis:

- Los términos disipativos asociados a la variable de daño representan la energía no recuperable almacenada en el material y su contribución es típicamente mucho menor (una fracción del 10 %, según [12], Sección 2.5.2) que la debida a deformaciones plásticas. Por tanto, dado que la modelización asume que las deformaciones son puramente termoelásticas, la disipación debida al daño es despreciable en la ecuación de balance energético.
- En régimen cuasiestático, la variación temporal de las deformaciones es también despreciable.

De esta forma, teniendo en cuenta (5.34) y las hipótesis anteriores, la relación (5.33) deriva en la ecuación de calor clásica:

$$\text{Div} (\kappa \nabla \theta) = \rho C_E \dot{\theta}. \quad (5.35)$$

Ley de conservación de momentos

Además de la ley de comportamiento tensión–deformación y del balance energético, debemos considerar también la ecuación de movimiento o conservación de momentos (véase [12]):

$$\rho \ddot{\vec{u}} - \text{Div} (\boldsymbol{\sigma}) = \vec{f}, \quad (5.36)$$

donde \vec{f} es la densidad de fuerzas volúmicas y \vec{u} el vector de desplazamientos.

En el caso cuasiestático, las variaciones de \vec{u} con el tiempo son despreciables y no se tiene en cuenta el término de inercia. Por tanto, (5.36) quedaría reducida a:

$$- \text{Div} (\boldsymbol{\sigma}) = \vec{f}. \quad (5.37)$$

Segundo Principio de la Termodinámica

Antes de comenzar con la modelización de la variable de daño, se hace imprescindible comprobar que la relación constitutiva obtenida es compatible con el *Segundo Principio de la Termodinámica*, que puede expresarse a través de la desigualdad de Clausius–Duhem. Esta desigualdad establece que la tasa de disipación energética ha de ser no negativa, es decir (véase [12], Sección 2.3.2):

$$\boldsymbol{\sigma} : \dot{\boldsymbol{\varepsilon}} - \rho \left(\dot{\psi} + s \dot{\theta} \right) - \vec{q} \cdot \frac{\nabla \theta}{\theta} \geq 0. \quad (5.38)$$

Dado que la energía libre de Helmholtz es función de todas las variables de estado, podemos escribir:

$$\dot{\psi} = \frac{\partial \psi}{\partial \boldsymbol{\varepsilon}} : \dot{\boldsymbol{\varepsilon}} + \frac{\partial \psi}{\partial \theta} \dot{\theta} + \frac{\partial \psi}{\partial D} \dot{D}. \quad (5.39)$$

Si introducimos esta descomposición en (5.38) obtenemos:

$$\boldsymbol{\sigma} : \dot{\boldsymbol{\varepsilon}} - \rho s \dot{\theta} - \rho \left(\frac{\partial \psi}{\partial \boldsymbol{\varepsilon}} : \dot{\boldsymbol{\varepsilon}} + \frac{\partial \psi}{\partial \theta} \dot{\theta} + \frac{\partial \psi}{\partial D} \dot{D} \right) - \vec{q} \cdot \frac{\nabla \theta}{\theta} \geq 0. \quad (5.40)$$

Teniendo en cuenta las leyes (5.14), (5.15) y (5.16), la ecuación (5.40) se puede expresar como:

$$Y\dot{D} - \vec{q} \cdot \frac{\nabla\theta}{\theta} \geq 0. \quad (5.41)$$

Sustituyendo la ley de Fourier (5.34) en esta inecuación (5.41) obtenemos:

$$Y\dot{D} + \kappa \frac{\nabla\theta \cdot \nabla\theta}{\theta} \geq 0, \quad (5.42)$$

donde vemos que el segundo término en (5.42) es siempre positivo.

Por tanto, una condición suficiente para que se verifique la desigualdad es:

$$Y\dot{D} \geq 0. \quad (5.43)$$

De la definición de Y en (5.16) y de la expresión para el potencial ψ en (5.17), se deduce:

$$Y = \frac{1}{2} \mathbf{\Lambda} : [\boldsymbol{\varepsilon} - \boldsymbol{\alpha}(\theta - \theta_0)] : [\boldsymbol{\varepsilon} - \boldsymbol{\alpha}(\theta - \theta_0)]. \quad (5.44)$$

Por tanto, Y es una función positiva. Es decir, la energía liberada por pérdida de rigidez del material en cada elemento de volumen representativo donde se produce daño es positiva (véase [13], Sección 2.1.1). En consecuencia, una condición suficiente para que se verifique el *Segundo Principio de la Termodinámica* es:

$$\dot{D} \geq 0. \quad (5.45)$$

Las restricciones termodinámicas exigen entonces que el daño del material no pueda decrecer, es decir, como mínimo ha de mantener su valor.

Sistema de ecuaciones diferenciales

Las relaciones (5.27), (5.35) y (5.37) constituyen las ecuaciones a resolver para un problema de termoelasticidad lineal isótropa con daño isótropo, a las que habrá que añadir las condiciones de contorno adecuadas. Dado que, a través de (5.10), conocido el vector de desplazamientos, se calcula el tensor de deformaciones, es pertinente la siguiente observación sobre nuestro conjunto de incógnitas y ecuaciones: tenemos 6 incógnitas provenientes de $\boldsymbol{\sigma}$, 3 incógnitas de \vec{u} , la temperatura θ y la variable de daño D , es decir, un total de 11 incógnitas. La ecuación tensorial (5.27) proporciona 6 ecuaciones independientes, la relación tensorial (5.37) otras 3 y la ecuación (5.35) una más, siendo un total de 10 ecuaciones. Además de las condiciones de contorno, que han de servir para establecer la unicidad de la solución del problema, necesitamos una ecuación más, que será la relativa a la evolución de la variable de daño, como veremos posteriormente.

Cabe destacar que nuestro problema está desacoplado, de forma que la solución de la ecuación (5.35) puede calcularse de forma independiente y en primer lugar, para así obtener el campo de temperaturas e introducirlo en las ecuaciones mecánicas antes de proceder a resolverlas. También se tendrá en cuenta el cálculo de temperaturas de los fluidos que circulan por el canal principal, como veremos posteriormente.

En resumen, a falta de modelizar el daño, tenemos el siguiente sistema de ecuaciones diferenciales:

$$\begin{cases} -\text{Div}(\boldsymbol{\sigma}) = \vec{f}, \\ \boldsymbol{\sigma} = \frac{(1-D)E}{(1+\nu)(1-2\nu)} [\nu \text{tr}(\boldsymbol{\varepsilon}(\vec{u})) \mathbf{I} + (1-2\nu)\boldsymbol{\varepsilon}(\vec{u}) - \alpha(\theta - \theta_0)(1+\nu)\mathbf{I}], \\ \text{Div}(\kappa \nabla \theta) = \rho C_E \dot{\theta}. \end{cases} \quad (5.46)$$

5.3. Modelos de daño para el hormigón

Tal y como hemos adelantado en la sección anterior, además de la ecuación constitutiva del material, la ley de conservación de la energía y la ecuación de movimiento, se necesita conocer la evolución de la variable de daño en cada instante del proceso mecánico a estudiar. Para el hormigón, las deformaciones irreversibles se deben principalmente a las microgrietas, por lo que se debe utilizar un modelo de elasticidad acoplado con daño (véase [12], Sección 5.1).

En general, se pueden considerar modelos anisótropos para el hormigón, donde las variables de daño son representadas por un tensor y dan cuenta de la respuesta diferente del material al daño en las distintas direcciones espaciales. Centraremos nuestra atención en los múltiples modelos de daño isótropo existentes, más sencillos y fáciles de implementar numéricamente.

Sirvan como ejemplo de modelos isótropos algunos de los implementados en Code Aster, como el modelo simple de daño frágil (véase [17]), de propósito general e incapaz de distinguir esfuerzos a compresión y a tracción. Otros, como el modelo de Badel (para más detalles, véase [18]), diferencian el daño a tracción y a compresión, aunque con resultados no completamente satisfactorios. Además, este modelo tiene en cuenta el fenómeno de restauración de rigidez del hormigón debido al efecto unilateral (véase Sección 5.2.1, *Concepto de tensión efectiva*). El modelo pionero y más extendido en la literatura para el daño isótropo en hormigón, también incluido en Code Aster, es el modelo de Mazars [11, 19], que será el utilizado en este trabajo.

El modelo de Mazars no tiene en cuenta el efecto de los cambios de temperatura en el daño del material. Sin embargo, en los diferentes trabajos de Gawin [20, 21] se aplica el modelo de Mazars a hormigón a altas temperaturas, incluyendo las deformaciones térmicas en la modelización. Se considera que la deformación, con independencia de su origen, es la causa del daño, de forma que se suma la contribución térmica a la elástica, ya presente en el modelo de Mazars original. En este trabajo aplicaremos esta metodología.

Comenzaremos describiendo el modelo original de Mazars para el hormigón, teniendo en cuenta solamente las deformaciones elásticas. A continuación, en la Sección 5.3.2, siguiendo el procedimiento de Gawin, incluiremos las deformaciones térmicas.

5.3.1. Modelo de daño de Mazars para el hormigón

Como ya hemos anticipado, uno de los modelos más utilizados para elasticidad con daño isótropo en hormigón es el de Mazars [19], propuesto inicialmente en la

década de 1980. Esta modelización tiene en cuenta el comportamiento disimétrico del hormigón a esfuerzos de tracción y compresión, dada la diferente resistencia del material a cada tipo de carga. En el primer caso, las microgrietas son creadas directamente por el alargamiento del material en la dirección de las tensiones. Por otro lado, en esfuerzos a compresión el material se alarga transversalmente (*efecto Poisson*), de forma perpendicular a la dirección de las tensiones. En el caso a compresión, el alargamiento transversal está controlado por el coeficiente de Poisson y el fenómeno de daño crece más lentamente (véase [11], Sección 3.4). Aunque esta modelización hace distinción entre el comportamiento del hormigón a tracción y compresión, dada la diferente resistencia mecánica del material a cada esfuerzo, el modelo de Mazars no tiene en cuenta el efecto unilateral para el hormigón descrito con anterioridad, asociado al cierre de grietas en compresión en procesos de carga cíclica.

El modelo de Mazars original considera únicamente las deformaciones elásticas en la evaluación del daño, al no contemplar variaciones térmicas. Por tanto, al mencionar conceptos asociados a las deformaciones en el modelo de Mazars original, nos estaremos refiriendo únicamente a las deformaciones elásticas. Este modelo hace hincapié en la gran incidencia de las deformaciones asociadas a esfuerzos de tracción como causa principal del daño, imponiéndose a las asociadas a compresión. Motivado por este hecho, para trasladar un estado triaxial en el espacio de deformaciones a un estado uniaxial equivalente, se define la *deformación equivalente*, $\bar{\varepsilon}$, como:

$$\bar{\varepsilon} = \sqrt{\sum_{i=1}^3 \langle \varepsilon_i \rangle_+^2}, \quad (5.47)$$

donde ε_i hace referencia a cada valor principal del tensor de deformaciones elásticas, ε^e , y $\langle \varepsilon_i \rangle_+$ denota la parte positiva de ε_i , de forma que $\langle \varepsilon_i \rangle_+ = \varepsilon_i$ si ε_i es positivo, y $\langle \varepsilon_i \rangle_+ = 0$ en otro caso.

A partir del concepto de deformación equivalente, se define en cada punto la función de fluencia f , asociada al criterio de daño:

$$f(\bar{\varepsilon}, K) = \bar{\varepsilon} - K, \quad (5.48)$$

siendo K una función que toma el máximo valor alcanzado por la deformación equivalente a lo largo de toda su historia de carga. En ausencia de daño, se tiene $K(0) = \varepsilon_{D_0}$, valor que marca el umbral de daño inicial. Matemáticamente, podemos expresarlo como:

$$K(t) = \max \left\{ \varepsilon_{D_0}, \max_{0 \leq s \leq t} [\bar{\varepsilon}(s)] \right\}. \quad (5.49)$$

Por tanto, cuando se cumpla que $f = 0$ estaremos sobre la superficie de fluencia y el material estará sufriendo daño.

A continuación, trataremos de ver cómo es la evolución del umbral de daño, $K(t)$. Para ello nos valdremos del siguiente resultado:

Lema. Sea $g(t)$ una función diferenciable en $[a, b]$ y $M(t) = \max \{G_a, \max_{a \leq s \leq t} g(s)\}$, con $G_a > g(a)$. Entonces, las funciones $M(t) - g(t)$ y $M'(t)$ son complementarias, es decir, verifican las siguientes condiciones (de Kuhn–Tucker):

$$\dot{M}(t) \geq 0, \quad M(t) - g(t) \geq 0, \quad \dot{M}(t) [M(t) - g(t)] = 0, \quad \text{c.p.d. en } (a, b). \quad (5.50)$$

Aplicando el resultado anterior a nuestro criterio de daño, es decir, tomando $G_a = \varepsilon_{D_0}$, $M = K$ y $g = \bar{\varepsilon}$, se tienen las siguientes relaciones de complementariedad:

$$\dot{K}(t) \geq 0, \quad f(t) \leq 0, \quad \dot{K}(t)f(t) = 0, \quad \text{c.p.d. en } (0, t). \quad (5.51)$$

En lo que sigue, nos centraremos principalmente en tratar de describir de forma adecuada la variable interna de daño. El comportamiento disimétrico del hormigón ya comentado motiva la siguiente división de D :

$$D = \alpha_t D_t + \alpha_c D_c, \quad (5.52)$$

siendo D_t el daño en tracción pura (análogamente D_c en compresión); α_t y α_c son funciones dependientes de la deformación equivalente que ponderan la relevancia de la tracción y la compresión en cada caso.

A continuación, consideramos el tensor de tensiones, σ , descompuesto como sigue:

$$\sigma = \langle \sigma \rangle_+ + \langle \sigma \rangle_-, \quad (5.53)$$

donde $\langle \sigma \rangle_+$ y $\langle \sigma \rangle_-$ son tensores contruidos a partir de las tensiones principales positivas y negativas de σ , respectivamente (véase [11], Sección 3.5).

Por analogía con la descomposición del tensor de tensiones, separamos el tensor de deformaciones, ε , como:

$$\varepsilon = \varepsilon_t + \varepsilon_c, \quad (5.54)$$

siendo la deformación a tracción, ε_t :

$$\varepsilon_t = \frac{1 + \nu}{E} \frac{\langle \sigma \rangle_+}{1 - D} - \frac{\nu}{E} \frac{\text{tr}(\langle \sigma \rangle_+)}{1 - D} \mathbf{I}, \quad (5.55)$$

y la deformación a compresión, ε_c :

$$\varepsilon_c = \frac{1 + \nu}{E} \frac{\langle \sigma \rangle_-}{1 - D} - \frac{\nu}{E} \frac{\text{tr}(\langle \sigma \rangle_-)}{1 - D} \mathbf{I}. \quad (5.56)$$

Siguiendo el procedimiento de [11], a partir de ε se calculan α_t y α_c :

$$\alpha_t = \sum_{i=1}^3 H_i(\varepsilon_i) \frac{\varepsilon_{ti} \varepsilon_i}{\varepsilon^2} \quad \alpha_c = \sum_{i=1}^3 H_i(\varepsilon_i) \frac{\varepsilon_{ci} \varepsilon_i}{\varepsilon^2}, \quad (5.57)$$

donde ε_{ti} y ε_{ci} hacen referencia a los autovalores de ε_t y ε_c ; H_i es igual a 1 si $\varepsilon_i \geq 0$, y 0 en otro caso. Se deduce que un esfuerzo de compresión pura, con $\alpha_t = 0$, no contribuye al daño, poniendo de manifiesto el escaso peso que el modelo original confiere a los esfuerzos compresivos como causa del daño.

Una vez definidas α_t y α_c , para conocer la evolución de la variable de daño cuando está activa, dada por (5.52), resta modelar D_t y D_c . A partir de resultados experimentales, se proponen las siguientes leyes de evolución [11]:

$$D_t = 1 - \frac{\varepsilon_{D_0}}{\bar{\varepsilon}} (1 - A_t) - A_t \exp[-B_t (\bar{\varepsilon} - \varepsilon_{D_0})], \quad (5.58)$$

$$D_c = 1 - \frac{\varepsilon_{D_0}}{\bar{\varepsilon}} (1 - A_c) - A_c \exp[-B_c (\bar{\varepsilon} - \varepsilon_{D_0})], \quad (5.59)$$

que permiten calcular D_c y D_t a partir de $\bar{\varepsilon}$.

Las constantes características del material A_t y B_t se obtienen por ensayos de flexión (el ensayo de tracción directa es demasiado inestable); análogamente, A_c y B_c se obtienen en experimentos de compresión.

En síntesis, el criterio de daño viene dado por (5.48) y las relaciones de complementariedad (5.51), de forma que la variable de daño se calcula a partir de las expresiones (5.52), (5.57)–(5.59).

5.3.2. Modelo de Mazars implementado en Code Aster

Haciendo pequeñas variaciones del modelo original de Mazars, descrito en la sección anterior, se han construido multitud de modelos que tienen en cuenta otros efectos de comportamiento del hormigón. En particular, el modelo descrito en [22], que está implementado en Code Aster, incluye ligeros cambios, mejorando la descripción del comportamiento a esfuerzos cortantes puros y a bicompresión. En lo sucesivo, describiremos los cambios introducidos en el modelo implementado en Code Aster respecto al original.

En primer lugar, se redefine la deformación equivalente, $\bar{\varepsilon}$, de forma que los esfuerzos a compresión tengan mayor relevancia en la aparición de daño, puesto que el modelo original primaba sobremanera la tracción como causa del mismo, apoyándose en la mayor resistencia a compresión del hormigón. Para tener esto en cuenta, se introduce la variable γ :

$$\gamma = -\frac{\sqrt{\sum_{i=1}^3 \langle \tilde{\sigma}_i \rangle_-^2}}{\sum_{i=1}^3 \langle \tilde{\sigma}_i \rangle_-}, \quad (5.60)$$

siendo $\langle \tilde{\sigma}_i \rangle_-$ la parte negativa del i -ésimo valor principal del tensor de tensiones efectivas, $\tilde{\boldsymbol{\sigma}}$. Se verifica $0 < \gamma < 1$ y, si no hay ninguna tensión efectiva negativa, en cuyo caso (5.60) estaría mal definida, se define γ igual a 1, como en el modelo original.

A partir de γ se define la deformación equivalente corregida, $\bar{\varepsilon}_{corr}$:

$$\bar{\varepsilon}_{corr} = \gamma \sqrt{\sum_{i=1}^3 \langle \varepsilon_i \rangle_+^2}. \quad (5.61)$$

La actuación de γ puede interpretarse como una reducción de la deformación equivalente respecto al modelo original, en caso de que existan esfuerzos a compresión. Por tanto, con este modelo aumenta la contribución al daño debida a deformaciones compresivas, dado que la función de fluencia también se ve modificada, y con ella el criterio de daño:

$$f(\bar{\varepsilon}_{corr}, K) = \bar{\varepsilon}_{corr} - K, \quad (5.62)$$

donde K es la máxima deformación equivalente corregida alcanzada a lo largo de toda su historia de carga. En ausencia de daño se tiene $K(0) = \varepsilon_{D_0}$, la deformación que marca el umbral de daño inicial. La máxima deformación alcanzada, $K(t)$, viene dada por:

$$K(t) = \max \left\{ \varepsilon_{D_0}, \max_{0 \leq s \leq t} [\bar{\varepsilon}_{corr}(s)] \right\}. \quad (5.63)$$

Además, la función de fluencia y la máxima deformación equivalente corregida alcanzada siguen cumpliendo las condiciones de complementariedad dadas por (5.51).

Por otro lado, aunque se mantiene la concepción separada de daño a tracción y a compresión, con objeto de simplificar el modelo se sustituye (5.52) por una nueva ley de evolución para la variable interna de daño, que depende de la máxima deformación alcanzada (5.63):

$$D(K) = 1 - \frac{\varepsilon_{D_0}}{K}(1 - A) - A \exp[-B(K - \varepsilon_{D_0})], \quad (5.64)$$

siendo A y B dos variables que dan cuenta del diferente comportamiento en tracción y compresión del hormigón, como veremos a continuación. Ambas variables se definen, en relación a resultados experimentales, de la siguiente manera:

$$A(r) = A_t \left[2r^2(1 - 2k) - r(1 - 4k) \right] + A_c(2r^2 - 3r + 1), \quad (5.65)$$

$$B(r) = r^2 B_t + (1 - r^2) B_c, \quad (5.66)$$

siendo k un parámetro experimental del modelo, relativo a esfuerzos tangenciales, que verifica

$$k = \frac{A(0.5)}{A_t}, \quad (5.67)$$

y la variable r se define como

$$r = \frac{\sum_{i=1}^3 \langle \tilde{\sigma}_i \rangle_+}{\sum_{i=1}^3 |\tilde{\sigma}_i|}, \quad (5.68)$$

y da cuenta del estado de tensiones del sistema. La expresión anterior estaría mal definida en ausencia de tensiones, por lo que en ese caso se considera $r = 1$. Aquí puede apreciarse el tratamiento dispar para tracción y compresión por parte del modelo, dado que cuando $r = 1$ (tracción), resulta $A = A_t$ y $B = B_t$; en cambio, si $r = 0$ (compresión) tenemos $A = A_c$ y $B = B_c$.

Por tanto, además de los parámetros elásticos, tenemos 6 parámetros asociados al modelo de daño: ε_{D_0} , A_c , A_t , B_c , B_t y k . En la Figura 5.4 observamos, de manera esquemática y para el caso bidimensional, la relación entre los distintos parámetros en juego.

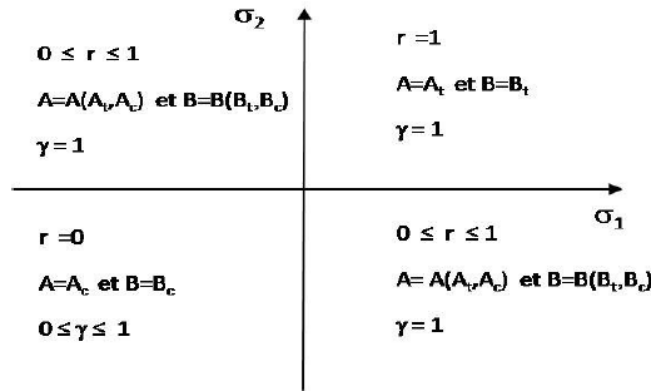


Figura 5.4: Evolución de r , A , B y γ en el plano $\sigma_3 = 0$ (imagen de [22]).

A continuación, describiremos de manera breve la interpretación de cada uno de los parámetros asociados a este modelo de daño.

- ε_{D_0} es el umbral de daño. Influye en la posición del máximo de tensión en la curva tensión–deformación y también en la forma de la curva posterior al pico. En general, ε_{D_0} se sitúa en el rango entre 0.5×10^{-4} y 1.5×10^{-4} .
- A , definido en (5.65), da lugar a una asíntota horizontal en la curva de tensión–deformación, de modo que $A = 1$ conlleva que la asíntota sea el propio eje de deformaciones, mientras que $A = 0$ indica una asíntota sin caída de tensión. Como hemos comentado, en régimen de tracción se tiene $A = A_t$ y en compresión $A = A_c$. A_c suele tomar valores entre 1 y 2, mientras A_t lo hace entre 0.7 y 1.

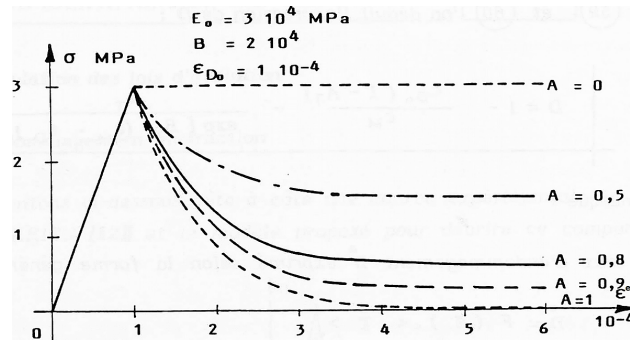


Figura 5.5: Variación de la posición de la asíntota horizontal post-pico con el parámetro A . En este caso se representa la variación con A_t , puesto que únicamente se muestra la tracción; el caso a compresión sería análogo (imagen de [22]).

- B , definido en (5.66), determina el decrecimiento de la tensión después del máximo, de modo que un mayor valor de B se asocia a una caída más abrupta. En compresión hemos visto que $B = B_c$, y este parámetro toma valores entre 10^3 y 2×10^3 . En tracción $B = B_t$, con valores situados entre 9×10^3 y 21×10^3 .

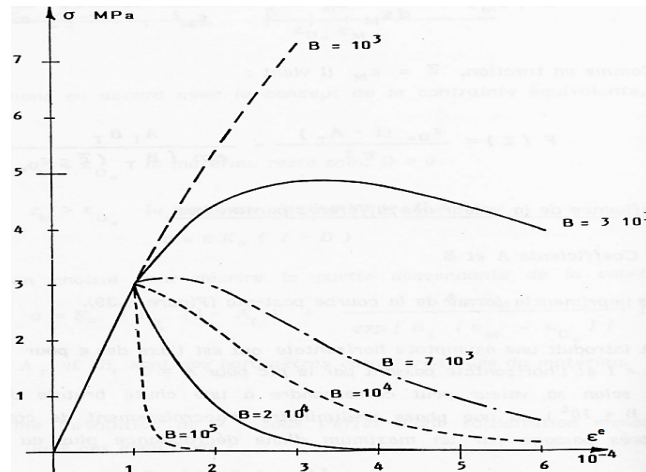


Figura 5.6: Variación de la caída de tensión post-pico con el parámetro B . En esta ocasión se observa la evolución con el valor de B_t , ya que estamos en el caso de tracción (análogamente para compresión) (imagen de [22]).

- k , definido en (5.67), es un parámetro que introduce una asíntota horizontal en la curva tensión-deformación para esfuerzos cortantes puros, de forma que el modelo implementado en Code Aster mejore al original de Mazars para este tipo de esfuerzos. Habitualmente k toma un valor cercano a 0.7, recuperándose el modelo original de Mazars para $k = 1$.

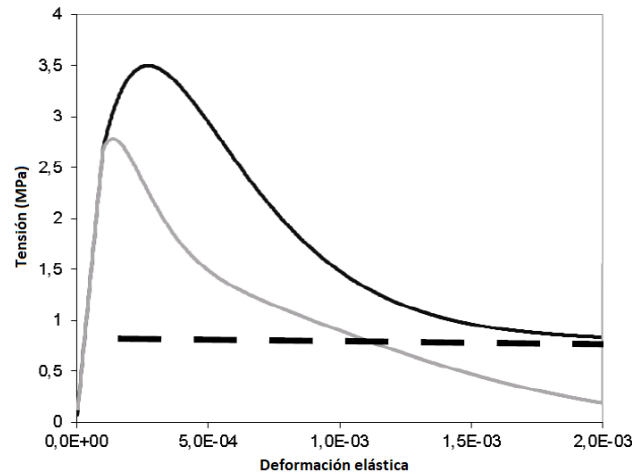


Figura 5.7: Asíntota horizontal (línea punteada) introducida en el modelo modificado (línea negra) para un valor $k \neq 1$, en un esfuerzo de cizalla. El modelo original de Mazars se representa en gris (imagen de [22]).

En resumen, el criterio de daño para el modelo de Mazars implementado en Code Aster viene dado por la relación (5.62), con la deformación equivalente definida en (5.61) y las condiciones de complementariedad (5.51). La variable interna de daño se calcula a partir de las expresiones (5.64)–(5.66).

Introducción de las deformaciones térmicas en el modelo de Mazars implementado en Code Aster

Hemos visto que ni el modelo de Mazars original ni el implementado en Code Aster tienen en cuenta las deformaciones térmicas en el cálculo del daño. En el problema del canal principal se producen deformaciones térmicas no despreciables, que deberían tener peso en la evaluación del daño producido sobre el material.

En general, se podría considerar una variable interna que diese cuenta del daño producido por las deformaciones térmicas y otra variable de daño asociada a las deformaciones mecánicas, cada una de ellas con su ley de evolución y acopladas en una variable de daño global. Un ejemplo de este procedimiento lo encontramos en [23], donde la parte mecánica sigue el modelo de Mazars y para el daño térmico se propone una ley sinusoidal, que depende de la máxima temperatura alcanzada en el material.

La consideración de una variable de daño térmico por separado exigiría el seguimiento de la evolución del campo de temperaturas en los diferentes instantes de la simulación térmica. Puesto que en este trabajo, para el problema del canal principal, comenzaremos el estudio del daño partiendo de un campo de temperaturas estacionario ya calculado, este tipo de modelización se hace inviable. Por tanto, seguiremos la propuesta de Gawin [20] (Sección 4), donde se considera que el daño crece con la deformación total (térmica más mecánica) de acuerdo con el modelo de Mazars. Para introducir las deformaciones térmicas en el modelo de Code Aster redefiniremos el concepto de deformación equivalente y, en consecuencia, el resto del modelo. Esta modificación puede llevarse a cabo gracias al software MFront implementado en Code Aster, descrito con más detalle en la Sección 7.1.2.

Por tanto, si consideramos la descomposición de las deformaciones en $\varepsilon = \varepsilon^e + \varepsilon^{th}$ y en la expresión (5.61) los valores principales ε_i se refieren al tensor de deformaciones totales, se tiene:

$$\bar{\varepsilon}_{corr} = \gamma \sqrt{\sum_{i=1}^3 \langle \varepsilon_i \rangle_+^2} = \gamma \sqrt{\sum_{i=1}^3 \langle \varepsilon_i^e + \varepsilon_i^{th} \rangle_+^2}, \quad (5.69)$$

donde ε_i^e y ε_i^{th} son los valores principales de ε^e y ε^{th} , respectivamente, y γ viene dada por (5.60).

Esta introducción de la deformación térmica en la definición de la deformación equivalente modifica el criterio de daño (5.62), a través de la relación (5.63). Además, la variable de daño (5.64) ahora incluye la deformación térmica, a raíz de la modificación de las variables (5.65) y (5.66). Teniendo en cuenta la definición de (5.68) en ausencia de tensiones, cuando se considera $r = 1$, el caso de expansión térmica pura se trata como una tracción.

Para esta modelización, tanto los parámetros termoelásticos como los parámetros del modelo de Mazars dependerían de la temperatura, ya que experimentalmente se observa que la relación tensión–deformación es diferente para cada temperatura (véase [24], Sección 5). En este trabajo no se tendrá en cuenta esta posible dependencia de los parámetros con la temperatura, dado que no disponemos de valores experimentales para los materiales que conforman el canal principal.

Capítulo 6

Modelización matemática del flujo multifásico del canal principal

6.1. Introducción

Para poder calcular el daño mecánico provocado por las deformaciones térmicas en el canal principal, es necesario conocer el campo de temperaturas a lo largo de este. En el cálculo de la temperatura, además de proporcionar un modelo térmico, es necesario describir el comportamiento dinámico de los fluidos a lo largo del canal principal, puesto que la interacción del flujo con la región sólida del canal principal, a través de las diferentes ecuaciones y condiciones de contorno, tendrá influencia en el posterior cálculo de la temperatura. Es decir, además de un modelo térmico para la parte sólida del canal principal (derivado a partir de (5.35)), también se necesita un modelo termohidrodinámico para los fluidos que discurren por él.

Como hemos comentado en la Sección 4.3, nuestro objetivo es estudiar el daño mecánico debido a las elevadas temperaturas del canal, partiendo de la temperatura de precalentamiento. Las mediciones experimentales y las simulaciones numéricas llevadas a cabo concluyen que se alcanza un estado estacionario de temperatura en el canal principal. Por tanto, utilizaremos las temperaturas obtenidas en [4], en donde se resuelve un modelo térmico estacionario.

En este capítulo, describiremos la modelización termohidrodinámica detallada en [4]. Posteriormente, la resolución numérica llevada a cabo en [4] servirá para alimentar el cálculo del daño mecánico que llevaremos a cabo en el Capítulo 7.

6.2. Modelo hidrodinámico

Sea Ω el dominio computacional total, con Ω_f el subdominio fluido y Ω_s el subdominio sólido, de forma que $\bar{\Omega} = \bar{\Omega}_f \cup \bar{\Omega}_s$. Como los flujos son considerados incompresibles y con propiedades constantes (véase la Tabla 4.5), la ecuación energética estará desacoplada del modelo hidrodinámico y podrá resolverse posteriormente, a fin de obtener la temperatura en cada punto.

En el dominio del problema se considera la mitad final del canal principal, de forma que los fluidos ya se han separado por diferencia de densidad. Una vez llegan a la parte final del canal, el arrabio continua su camino tras de pasar por el *skimmer* y la escoria sigue una ruta alternativa. En la Figura 6.1 podemos ver el dominio computacional, con las diferentes fronteras que lo conforman.

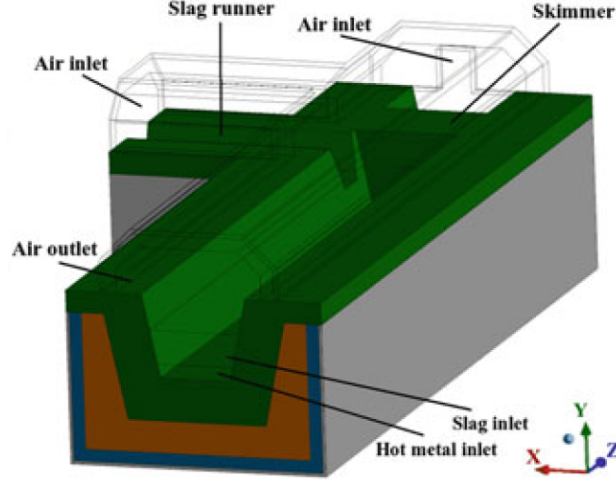


Figura 6.1: Dominio computacional del problema (imagen extraída de [4]).

6.2.1. Flujo de superficie libre

El flujo que transcurre por el canal principal del horno alto está compuesto por tres fases: el metal líquido, la escoria y el aire. Para calcular el dominio ocupado por cada fase y las consiguientes propiedades del flujo en esa zona, se utiliza el método de *volumen de fluido* (VOF). Este método considera que cada fase ocupa una cierta región, y por tanto las propiedades de los fluidos están descritas por funciones constantes a trozos.

El método VOF introduce el concepto de *fracción volúmica*, α_i , de cada fase i del fluido, en cada celda del dominio computacional. Si α_i vale 1, la fase i ocupa completamente esa celda; si α_i vale 0, no hay fase i en la celda. Cualquier valor de α_i entre 0 y 1 implica la existencia de una superficie libre en dicha celda, con presencia de varias fases.

Una vez conocida la fracción volúmica de cada fase en cada celda, una propiedad $\tilde{\phi}$ del fluido, asociada a la propiedad ϕ_i de cada fase del flujo, se define como:

$$\tilde{\phi} = \sum_{i=1}^N \phi_i \alpha_i, \quad (6.1)$$

siendo $N = 3$ el número total de fases (aire, escoria y metal líquido).

La evolución temporal y espacial de la fracción volúmica α_i se acopla con la evolución hidrodinámica del problema, como veremos a continuación.

6.2.2. Modelo hidrodinámico

El flujo del problema es turbulento y necesita la inclusión de un modelo de turbulencia adecuado. El modelo elegido es el SST k - ω , que incluye dos nuevas variables utilizadas para calcular la viscosidad turbulenta, μ_T : la *tasa de disipación específica*, ω , y la *energía cinética turbulenta*, k .

Por tanto, si añadimos el modelo VOF a las ecuaciones de Navier–Stokes para un flujo incompresible con modelo de turbulencia SST k - ω , tenemos el siguiente sistema de ecuaciones en derivadas parciales en el dominio Ω_f (véase [4]):

$$\left\{ \begin{array}{l} \operatorname{div}(\vec{V}) = 0, \\ \frac{\partial \alpha_i}{\partial t} + \operatorname{div}(\alpha_i \vec{V}) = 0, \quad 1 \leq i \leq 3, \\ \frac{\partial(\bar{\rho} \vec{V})}{\partial t} + \operatorname{div}(\bar{\rho} \vec{V} \otimes \vec{V}) = \operatorname{div} \left[2(\tilde{\mu} + \tilde{\mu}_T) \mathbf{D}(\vec{V}) - \frac{2}{3} \bar{\rho} k \mathbf{I} \right] - \operatorname{grad}(\Pi) + \vec{f}, \\ \frac{\partial(\bar{\rho} k)}{\partial t} + \operatorname{div}(\bar{\rho} k \vec{V}) = \operatorname{div} \left[\left(\tilde{\mu} + \frac{\tilde{\mu}_T}{\sigma_k} \right) \operatorname{grad}(k) \right] + G_k - Y_k, \\ \frac{\partial(\bar{\rho} \omega)}{\partial t} + \operatorname{div}(\bar{\rho} \omega \vec{V}) = \operatorname{div} \left[\left(\tilde{\mu} + \frac{\tilde{\mu}_T}{\sigma_\omega} \right) \operatorname{grad}(\omega) \right] + G_\omega - Y_\omega + D_\omega. \end{array} \right. \quad (6.2)$$

En el sistema de ecuaciones anterior, Π y \vec{V} son los campos medios de presión π y velocidad \vec{v} , respectivamente, y $\mathbf{D}(\vec{V})$ la parte simétrica del gradiente de velocidad media. Además, $\vec{f} = -\bar{\rho} g \vec{e}_2$ es la densidad de fuerza volúmica de gravedad. Los términos G_k y G_ω denotan contribuciones de producción, los términos Y_k y Y_ω son disipativos y D_ω es la difusión cruzada, todos ellos asociados a k y ω . Las constantes σ_k y σ_ω también están ligadas a la turbulencia. Para más detalles, véase [4].

Por tanto, a falta de condiciones iniciales y de contorno que completen el modelo hidrodinámico, se tiene un sistema de 9 ecuaciones diferenciales con un total de 9 incógnitas (3 componentes de la velocidad media, 3 fracciones volúmicas, presión media, k y ω).

En el modelo hidrodinámico se distinguen tres tipos de fronteras en el contorno asociado al dominio fluido, que pueden apreciarse en la Figura 6.1: entradas, salidas y paredes. En las entradas de aire, escoria y metal líquido se imponen velocidades de entrada conocidas. En la salida del aire se impone presión atmosférica y en las salidas de la escoria y del arrabio se utilizan perfiles hidrostáticos. En las paredes se imponen condiciones de no deslizamiento y leyes de pared, debido al flujo turbulento.

Dado que el modelo hidrodinámico se utiliza como paso previo imprescindible para resolver el problema térmico estacionario, se toman condiciones iniciales que permitan una rápida convergencia a un estado cuasiestático.

6.3. Modelo térmico

Una vez resuelto el problema hidrodinámico, los resultados obtenidos se utilizan para alimentar el modelo térmico. La turbulencia juega un papel importante en el subdominio fluido, acentuando el transporte difusivo de calor debido a las fluctuaciones de velocidad. Esta fenomenología se tiene en cuenta introduciendo

en el modelo térmico la *conductividad térmica turbulenta*, κ_T , calculada a partir de la viscosidad turbulenta, μ_T . Por tanto, la temperatura en el interior de los subdominios fluido y sólido, $\Omega_f \cup \Omega_s$, se obtiene a partir de las siguientes ecuaciones:

$$\begin{cases} \operatorname{div} (\tilde{\rho} \tilde{c}_p \vec{V} \theta) = \operatorname{div} [(\tilde{\kappa} + \tilde{\kappa}_T) \operatorname{grad} (\theta)] & \text{en } \Omega_f, \\ \operatorname{Div} (\kappa \nabla \theta) = 0 & \text{en } \Omega_s. \end{cases} \quad (6.3)$$

Tenemos dos ecuaciones diferenciales escalares (una en Ω_f y otra en Ω_s) que nos proporcionan el campo de temperaturas en cada subdominio. Se exige la continuidad de la temperatura y del flujo térmico en las fronteras entre sólidos y fluidos, excepto en el caso de la cubierta refractaria, en contacto con el aire, puesto que ahí tiene lugar la transferencia de calor por radiación. Para modelar este fenómeno se utiliza un método S2S (*superficie a superficie*), que permite obtener la contribución de radiación al salto del flujo térmico en cada punto.

De cara a la aplicación de condiciones de contorno, se distinguen las siguientes zonas (véase Figura 6.1): paredes externas, entradas y salidas de flujo y otras fronteras. En las paredes externas del canal principal se establecen condiciones de contorno de convección con el aire, teniendo en cuenta la emisión de radiación al ambiente en la cubierta exterior. En las entradas de flujo se imponen temperaturas conocidas para el metal líquido y el aire, y un perfil de temperaturas para la escoria. En las salidas de flujo y en el resto de fronteras se imponen principalmente condiciones de flujo de temperatura nulo. Para más detalles sobre las condiciones de contorno empleadas, consúltase [4].

Capítulo 7

Simulación numérica

En este capítulo nos centramos en la resolución numérica del problema termomecánico con daño planteado en el Capítulo 5. Comenzaremos describiendo someramente los paquetes de software empleados para llevar a cabo los cálculos. Para entender mejor el modelo y su resolución numérica, nos planteamos diseñar y resolver distintos ejemplos académicos con solución conocida. Estos se detallan en la Sección 7.3. Posteriormente, se utilizarán los resultados de la simulación termohidrodinámica llevada a cabo en [4] para simular el daño en el canal. A partir de la distribución de temperaturas allí obtenida se analiza la contribución de las deformaciones termomecánicas al daño en el canal principal.

7.1. Descripción de los paquetes de software utilizados

7.1.1. Code Aster

La simulación numérica del problema de daño mecánico se llevó a cabo utilizando el paquete de cálculo Code Aster (descripción más detallada en [25]). Este software, actualmente de código abierto, ha sido desarrollado principalmente en los años 90 por el departamento de I+D de EDF (*Électricité de France*), una de las mayores compañías mundiales de generación y distribución eléctrica a nivel mundial. A día de hoy, es un software ampliamente empleado en ámbitos industriales y académicos. De hecho, la empresa ArcelorMittal se muestra interesada en la utilización de alternativas de software libre para simulación mecánica, especialmente Code Aster, por eso este paquete ha sido la herramienta de cálculo empleada en el presente trabajo.

Para ser más precisos, Code Aster es un *solver* de análisis estructural y termomecánico, que no incluye herramientas de preprocesamiento (geometría y malla) ni postprocesamiento (visualización de resultados). Con intención de remediar este problema, Code Aster está integrado en la plataforma Salome Meca junto a *SALOME*, que le proporciona un marco general de funcionamiento, confiriéndole herramientas de preprocesamiento y posprocesamiento.

Code Aster está basado en la mecánica de medios continuos, incluyendo aplicaciones mecánicas, térmicas, acústicas o sísmicas. Para resolver las ecuaciones diferenciales utiliza el método de los elementos finitos (FEM), contando con más de

400 tipos de elementos. Asimismo, el número de leyes de comportamiento materiales de todo tipo incluidas supera las 200, teniendo además la capacidad para resolver un amplio rango de problemas: estáticos, dinámicos, vibraciones, análisis modal, unión metalúrgica... Puede resolver también tres tipos de problemas no lineales: contacto y fricción, leyes de comportamiento de materiales no lineales y problemas cinemáticos (grandes desplazamientos, deformaciones o rotaciones).

Aparte de los modelos habituales en elasticidad o plasticidad, este software incluye modelos de fractura, fatiga y daño, de especial interés para nuestro problema. Incorpora diversas leyes de daño, algunas de ellas propias del hormigón, con comportamiento elástico frágil (diferenciando esfuerzos a tracción y compresión), elastoplástico, específico para hormigón armado y pretensado, con efectos de fluencia, corrosión, hidratación...

Code Aster está escrito en un lenguaje propio, creado a partir de Python. Por tanto, más allá de la interfaz gráfica que proporciona Salome Meca, Code Aster cuenta también con una buena integración con este lenguaje de programación, lo que permitiría trabajar directamente en el código, a fin de introducir nuevos tipos de elementos finitos o leyes de comportamiento distintas a las incluidas en el software, entre otras posibilidades.

La principal ventaja de Code Aster respecto a otros paquetes de cálculo comerciales es la posibilidad de tener un mayor control sobre la simulación, ya que en sus guías de usuario aporta mucha más información acerca de los modelos utilizados y sobre su funcionamiento interno, a diferencia del software comercial, que habitualmente es más opaco.

7.1.2. MFfront: inclusión de la deformación térmica en el modelo

En la Sección 5.3.2 analizamos cómo incluir las deformaciones térmicas en el criterio de daño desarrollado por Mazars. Puesto que esta opción no está presente en Code Aster, tenemos que modificar la ley de comportamiento incorporada en el software. Para ello empleamos MFfront, un generador de propiedades materiales y leyes de comportamiento que pueden ser incorporadas a diversos *solvers*, en particular a Code Aster.

MFfront es un desarrollo de EDF en colaboración con CAE (Comisión de Energía Atómica de Francia). Está basado en C++ y se incluye en Code Aster a través de una librería de software. Con MFfront se pueden implementar múltiples comportamientos mecánicos a través de un lenguaje de alto nivel. Para más detalles sobre la implementación de MFfront en Code Aster puede consultarse [26].

7.2. Consideraciones generales

En el Capítulo 5, planteamos el problema termomecánico cuasiestático siguiente:

$$\begin{cases} \text{Div} (\kappa \nabla \theta) = \rho C_E \dot{\theta}, \\ -\text{Div} (\boldsymbol{\sigma}) = \vec{f}, \\ \boldsymbol{\sigma} = \frac{(1-D)E}{(1+\nu)(1-2\nu)} [\nu \text{tr} (\boldsymbol{\varepsilon}(\vec{u})) \mathbf{I} + (1-2\nu)\boldsymbol{\varepsilon}(\vec{u}) - \alpha(\theta - \theta_0)(1+\nu)\mathbf{I}], \end{cases} \quad (7.1)$$

junto al modelo de daño de Mazars, dado por las condiciones de Khun–Tucker (5.51) y la ley de evolución (5.64), y las condiciones iniciales y de contorno adecuadas.

La teoría del daño se basa en la evolución de las deformaciones, de forma que podamos ir calculando la máxima deformación alcanzada en cada momento para deducir si el material está dañado. Pero, como ya hemos explicado, por problemas de computación disponemos solamente de las temperaturas en estado estacionario. Por tanto, planteamos la siguiente metodología:

Dado el campo de temperaturas θ en Ω_s , resolver el siguiente problema:

$$\left\{ \begin{array}{ll} -\text{Div}(\boldsymbol{\sigma}) = \vec{f}\tau & \text{en } \Omega_s \times (0, 1], \\ \boldsymbol{\sigma} = \frac{(1-D)E}{(1+\nu)(1-2\nu)} [\nu \text{tr}(\boldsymbol{\varepsilon}(\vec{u})) \mathbf{I} + (1-2\nu)\boldsymbol{\varepsilon}(\vec{u}) - \alpha(\theta - \theta_0)(1+\nu)\mathbf{I}] & \text{en } \Omega_s \times (0, 1], \\ D = 1 - \frac{\varepsilon_{D_0}}{K}(1-A) - A \exp[-B(K - \varepsilon_{D_0})] & \text{en } \Omega_s \times (0, 1], \\ \dot{K} \geq 0, \quad \bar{\varepsilon}_{corr} - K \leq 0, \quad \dot{K}(\bar{\varepsilon}_{corr} - K) = 0 & \text{en } \Omega_s \times (0, 1], \end{array} \right. \quad (7.2)$$

con las condiciones iniciales y de contorno adecuadas.

De esta forma, se resuelve el problema mecánico de forma incremental, aplicando las cargas y las condiciones de contorno gradualmente. Por tanto, $\tau = 0$ corresponde al estado inicial descargado y $\tau = 1$ es el problema termoelástico que queremos resolver. El incremento de τ en cada paso es calculado automáticamente por Code Aster, reduciéndolo en caso de que la simulación no converja para un determinado valor. Seguimos este procedimiento pensando en el problema del canal, donde conocemos las cargas sobre la estructura y las impondremos gradualmente.

7.3. Test numéricos

Antes de realizar la simulación del problema del canal principal, llevaremos a cabo una serie de test numéricos sencillos con solución analítica conocida, para poder compararla con la obtenida numéricamente. En primer lugar, en los Test 1 y 2, comprobaremos que el modelo de MFront es capaz de resolver satisfactoriamente problemas elásticos, en ausencia de deformaciones térmicas, de lo cual ya es capaz el modelo de Mazars implementado por defecto en Code Aster. Posteriormente, resolviendo los Test 3 y 4, donde la única deformación es la térmica, verificaremos si hemos introducido correctamente las modificaciones deseadas en el modelo de Mazars, pudiendo comprobar si existe una concordancia aceptable entre los resultados, en particular, para la variable interna de daño. Por último, en el Test 5, incluimos deformaciones térmicas y elásticas, como en el problema de interés en el canal principal.

Por analogía con el caso real, en los Test 3, 4 y 5, en los que se consideran deformaciones térmicas, se resuelve en primer lugar el problema térmico estacionario. A continuación, se utiliza el campo de temperaturas obtenido para la posterior resolución mecánica.

7.3.1. Parámetros

En relación a los diferentes parámetros presentes en las ecuaciones, además de los termoelásticos (módulo de elasticidad, coeficiente de Poisson, coeficiente de dilatación térmica y conductividad térmica), tenemos 6 parámetros asociados al modelo de daño: ε_{D_0} , A_c , A_t , B_c , B_t y k .

En esta serie de test numéricos, para los parámetros elásticos escogemos valores típicos del hormigón. En cuanto a los parámetros del modelo de Mazars, los valores tomados están dentro de los intervalos recomendados en la Sección 5.3.2, aunque el hecho de incluir la deformación térmica podría cambiar el rango de validez de esos valores típicos. En los diferentes test utilizaremos los siguiente valores:

Parámetro	Valor	Parámetro	Valor
E	20×10^9 Pa	A_t	1
ν	0.2	B_c	10^3
A_c	1.4	B_t	9×10^3
k	0.7	ε_{D_0}	9×10^{-5} (Test 1 y 2) 2×10^{-4} (Test 3, 4 y 5)
α	10^{-7} °C $^{-1}$	κ	1 W m $^{-1}$ °C $^{-1}$

Tabla 7.1: Parámetros empleados en los test.

7.3.2. Geometría y malla

En todos los test, el cálculo se llevará a cabo sobre el dominio espacial Ω_s , siendo:

$$\Omega_s = \{(x, y, z) \mid 0 < x < 200, 0 < y < 200, 0 < z < 10\}. \quad (7.3)$$

La frontera del dominio, $\partial\Omega_s = \bigcup_{i=1}^6 \Gamma_i$, se define como:

$$\left\{ \begin{array}{l} \Gamma_1 = \{(x, y, z) \in \overline{\Omega_s} \mid x = 0\}, \\ \Gamma_2 = \{(x, y, z) \in \overline{\Omega_s} \mid x = 200\}, \\ \Gamma_3 = \{(x, y, z) \in \overline{\Omega_s} \mid y = 0\}, \\ \Gamma_4 = \{(x, y, z) \in \overline{\Omega_s} \mid y = 200\}, \\ \Gamma_5 = \{(x, y, z) \in \overline{\Omega_s} \mid z = 0\}, \\ \Gamma_6 = \{(x, y, z) \in \overline{\Omega_s} \mid z = 10\}. \end{array} \right. \quad (7.4)$$

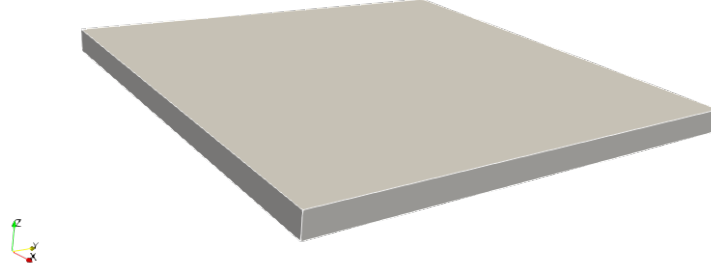


Figura 7.1: Geometría del problema test.

A lo largo de los test numéricos se empleará una malla de elementos finitos cuadráticos, conformada por hexaedros, con un total de 233411 nodos. Las simulaciones se llevan a cabo en un PC con procesador Intel Core i7-4510U a 2.6 GHz x64, memoria RAM de 16 GB y tarjeta gráfica Nvidia GeForce GT 480M. El tiempo de simulación aproximado de cada uno de los test es de 45 minutos.

Para evaluar la precisión de la resolución numérica, se calcula el error relativo en norma 2 para la temperatura, el campo de desplazamientos, las tensiones, las deformaciones y el daño. Sea w una magnitud escalar (por ejemplo T o D), definida en cada uno de los N nodos de la malla. Sea w_i^n el valor de w , calculado numéricamente, en el nodo i y sea w_i^t el valor de w , calculado teóricamente, en el nodo i , con $1 \leq i \leq N$. El error relativo de w en norma 2, $\|w\|_2$, viene dado por:

$$\|w\|_2 = \sqrt{\frac{\sum_{i=1}^N (w_i^t - w_i^n)^2}{\sum_{i=1}^N (w_i^t)^2}}. \quad (7.5)$$

Si w es una magnitud vectorial (\vec{u}) o tensorial (como $\boldsymbol{\varepsilon}$ o $\boldsymbol{\sigma}$), se construye un vector que contenga todas las componentes de w evaluadas en cada uno de los nodos de la malla. Sea j una componente de w , con $1 \leq j \leq M$. Entonces, el error relativo de w en norma 2, $\|w\|_2$, viene dado por:

$$\|w\|_2 = \sqrt{\frac{\sum_{j=1}^M \sum_{i=1}^N (w_{i,j}^t - w_{i,j}^n)^2}{\sum_{j=1}^M \sum_{i=1}^N (w_{i,j}^t)^2}}. \quad (7.6)$$

Una vez descrita la parte común a todos los test (la geometría, la malla y los parámetros), las condiciones de contorno térmicas y mecánicas, así como las cargas aplicadas, serán diferentes en cada caso. A continuación, nos centraremos en describir en detalle cada uno de los test.

7.3.3. Test 1: Modelo mecánico con daño. Desplazamiento lineal

Modelo mecánico con daño

En ausencia de deformaciones térmicas, se considera el siguiente problema mecánico:

$$\left\{ \begin{array}{ll} -\text{Div}(\boldsymbol{\sigma}) = \vec{0} & \text{en } \Omega_s \times (0, 1], \\ \boldsymbol{\sigma} = \frac{(1-D)E}{(1+\nu)(1-2\nu)} [\nu \text{tr}(\boldsymbol{\varepsilon}(\vec{u})) \mathbf{I} + (1-2\nu)\boldsymbol{\varepsilon}(\vec{u})] & \text{en } \Omega_s \times (0, 1], \\ D = 1 - \frac{\varepsilon_{D_0}}{K} (1-A) - A \exp[-B(K - \varepsilon_{D_0})] & \text{en } \Omega_s \times (0, 1], \\ \dot{K} \geq 0, \quad \bar{\varepsilon}_{corr} - K \leq 0, \quad \dot{K}(\bar{\varepsilon}_{corr} - K) = 0 & \text{en } \Omega_s \times (0, 1], \\ \vec{u} = \vec{0} & \text{sobre } \Gamma_3 \times (0, 1], \\ \boldsymbol{\sigma} \vec{n} = -C\nu\tau\vec{e}_1 & \text{sobre } \Gamma_1 \times (0, 1], \\ \boldsymbol{\sigma} \vec{n} = C\nu\tau\vec{e}_1 & \text{sobre } \Gamma_2 \times (0, 1], \\ \boldsymbol{\sigma} \vec{n} = C(1-\nu)\tau\vec{e}_2 & \text{sobre } \Gamma_4 \times (0, 1], \\ \boldsymbol{\sigma} \vec{n} = -C\nu\tau\vec{e}_3 & \text{sobre } \Gamma_5 \times (0, 1], \\ \boldsymbol{\sigma} \vec{n} = C\nu\tau\vec{e}_3 & \text{sobre } \Gamma_6 \times (0, 1], \\ \vec{u}(0) = \vec{0} & \text{en } \Omega_s, \\ K(0) = \varepsilon_{D_0} & \text{en } \Omega_s, \end{array} \right. \quad (7.7)$$

siendo $C = \frac{E \exp(-9 \times 10^{-2})}{10^4(1+\nu)(1-2\nu)}$.

Se puede comprobar que el campo de desplazamientos solución de (7.7) en $\tau = 1$ viene dado por:

$$\vec{u}(x, y, z, 1) = (0, 10^{-4}y, 0). \quad (7.8)$$

A partir del campo de desplazamientos se tiene el tensor de deformaciones en $\tau = 1$ (véase (5.10)):

$$\boldsymbol{\varepsilon}(1) = \boldsymbol{\varepsilon}^e = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 0 & 10^{-4} & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}. \quad (7.9)$$

Una vez se tiene el tensor de deformaciones, procedemos a calcular la deformación equivalente y, a continuación, la variable de daño. Puesto que estamos en un caso a tracción, en todo punto se tendrá $\gamma = 1$ (5.60) y $r = 1$ (5.68), de modo que en (5.65) y (5.66) se obtiene $A = A_t$ y $B = B_t$.

A partir de (5.69), la deformación equivalente corregida será:

$$\bar{\varepsilon}_{corr}(1) = \gamma \sqrt{\sum_{i=1}^3 \langle \varepsilon_i \rangle_+^2} = \sqrt{(10^{-4})^2} = 10^{-4}. \quad (7.10)$$

Por tanto, la máxima deformación equivalente en $\tau = 1$, $K(1)$, dada por (5.63), es constante en el dominio y vale:

$$K(1) = \max \left\{ \varepsilon_{D_0}, \max_{0 \leq s \leq 1} [\bar{\varepsilon}_{corr}(s)] \right\} = 10^{-4}, \quad (7.11)$$

puesto que $\varepsilon_{D_0} = 9 \times 10^{-5}$ (ver Tabla 7.1).

En consecuencia, la función de daño en $\tau = 1$, dada en (7.7), es también constante en todo el dominio y toma el valor (véase Tabla 7.1):

$$D(1) = 1 - \exp \left[-9000 \left(10^{-4} - 9 \times 10^{-5} \right) \right] = 1 - \exp \left(-9 \times 10^{-2} \right) \approx 8.606 \times 10^{-2}. \quad (7.12)$$

Utilizando la relación tensión–deformación en (7.7), calculamos el tensor de tensiones en $\tau = 1$:

$$\boldsymbol{\sigma}(1) = C \begin{pmatrix} \nu & 0 & 0 \\ 0 & 1 - \nu & 0 \\ 0 & 0 & \nu \end{pmatrix}. \quad (7.13)$$

Resolviendo numéricamente el sistema de ecuaciones (7.7), los errores relativos en norma 2 obtenidos para las diferentes magnitudes en el instante $t = 1$ son:

Magnitud	Error
\vec{u}	9.4×10^{-6}
ε	9.4×10^{-6}
$\boldsymbol{\sigma}$	9.4×10^{-7}
D	9.0×10^{-5}

Tabla 7.2: Errores relativos obtenidos para \vec{u} , ε , $\boldsymbol{\sigma}$ y D .

Los errores relativos obtenidos, que cabría esperar menores para un test lineal, se ven afectados por la existencia de daño en toda la placa. De hecho, los errores son considerablemente mayores en la zona de daño respecto a la zona no dañada.

7.3.4. Test 2: Modelo mecánico con daño. Desplazamiento no lineal

Modelo mecánico con daño

Sea \vec{f} la densidad de fuerzas de volumen siguiente:

$$\vec{f} = \begin{cases} -C(1 - \nu) \vec{e}_2 & \text{si } y \leq y_D, \\ -C(1 - \nu) [1 - g(y)] \exp[-g(y) + 0.81] \vec{e}_2 & \text{si } y > y_D, \end{cases} \quad (7.14)$$

donde

$$C = \frac{E}{2 \times 10^6 (1 + \nu)(1 - 2\nu)}, \quad (7.15)$$

$$g(y) = 4.5 \times 10^{-3} y, \quad (7.16)$$

e

$$y_D = 180 \text{ m}. \quad (7.17)$$

Sea $h(y)$ la función definida a trozos:

$$h(y) = \begin{cases} 1 & \text{si } y \leq y_D, \\ \exp[-g(y) + 0.81] & \text{si } y > y_D. \end{cases} \quad (7.18)$$

Se considera el problema elástico con daño:

$$\left\{ \begin{array}{ll} -\text{Div}(\boldsymbol{\sigma}) = \vec{f}\tau & \text{en } \Omega_s \times (0, 1], \\ \boldsymbol{\sigma} = \frac{(1-D)E}{(1+\nu)(1-2\nu)} [\nu \text{tr}(\boldsymbol{\varepsilon}(\vec{u})) \mathbf{I} + (1-2\nu)\boldsymbol{\varepsilon}(\vec{u})] & \text{en } \Omega_s \times (0, 1], \\ D = 1 - \frac{\varepsilon_{D_0}}{K} (1-A) - A \exp[-B(K - \varepsilon_{D_0})] & \text{en } \Omega_s \times (0, 1], \\ \dot{K} \geq 0, \quad \bar{\varepsilon}_{corr} - K \leq 0, \quad \dot{K}(\bar{\varepsilon}_{corr} - K) = 0 & \text{en } \Omega_s \times (0, 1], \\ \vec{u} = \vec{0} & \text{sobre } \Gamma_3 \times (0, 1], \\ \boldsymbol{\sigma}\vec{n} = -C\nu y h(y) \tau \vec{e}_1 & \text{sobre } \Gamma_1 \times (0, 1], \\ \boldsymbol{\sigma}\vec{n} = C\nu y h(y) \tau \vec{e}_1 & \text{sobre } \Gamma_2 \times (0, 1], \\ \boldsymbol{\sigma}\vec{n} = C(1-\nu)200h(200)\tau \vec{e}_2 & \text{sobre } \Gamma_4 \times (0, 1], \\ \boldsymbol{\sigma}\vec{n} = -C\nu y h(y) \tau \vec{e}_3 & \text{sobre } \Gamma_5 \times (0, 1], \\ \boldsymbol{\sigma}\vec{n} = C\nu y h(y) \tau \vec{e}_3 & \text{sobre } \Gamma_6 \times (0, 1], \\ \vec{u}(0) = \vec{0} & \text{en } \Omega_s, \\ K(0) = \varepsilon_{D_0} & \text{en } \Omega_s. \end{array} \right. \quad (7.19)$$

A diferencia del Test 1, donde el campo de desplazamientos era una función lineal de la coordenada y , en este problema el campo \vec{u} solución de (7.19) en $\tau = 1$ es cuadrático y viene dado por:

$$\vec{u}(x, y, z, 1) = \left(0, \frac{y^2}{4 \times 10^6}, 0 \right). \quad (7.20)$$

Para comprobar que este campo es solución de (7.19) para $\tau = 1$, comenzamos calculando, a partir de la definición (5.10), el tensor de deformaciones:

$$\boldsymbol{\varepsilon}(1) = \boldsymbol{\varepsilon}^e = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 0 & \frac{y}{2 \times 10^6} & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}. \quad (7.21)$$

Una vez obtenidos los tensores de tensiones y deformaciones, podemos calcular la deformación equivalente y la variable de daño. Como la coordenada y siempre

toma valores no negativos, estamos nuevamente en un caso de tracción pura, con lo cual se tiene en todo punto $\gamma = 1$ (5.60) y $r = 1$ (5.68). En consecuencia, las relaciones (5.65) y (5.66) implican que $A = A_t$ y $B = B_t$.

En vista de lo anterior, la deformación equivalente corregida en $\tau = 1$ es (véase (5.69)):

$$\bar{\varepsilon}_{corr}(1) = \gamma \sqrt{\sum_{i=1}^3 \langle \varepsilon_i \rangle_+^2} = \frac{y}{2 \times 10^6}. \quad (7.22)$$

En consecuencia, el valor que toma la máxima deformación equivalente alcanzada, K , dada por (5.63), depende de la coordenada y . La función de fluencia (5.62) no se anula en $\tau = 1$ si K no es mayor que ε_{D_0} , y, por tanto, no se produce daño en el material. Es decir, la coordenada y_D a partir de la cual comienza a producirse daño es solución de la igualdad $K = \varepsilon_{D_0}$:

$$\frac{y_D}{2 \times 10^6} = \varepsilon_{D_0} = 9 \times 10^{-5} \Rightarrow y_D = 180 \text{ m}, \quad (7.23)$$

de forma que el daño comienza a partir de $y_D = 180 \text{ m}$.

En consecuencia, la variable de daño es:

$$D(1) = \begin{cases} 0 & \text{si } y \leq y_D, \\ 1 - \exp \left[-9000 \left(\frac{y}{2 \times 10^6} - 9 \times 10^{-5} \right) \right] & \text{si } y > y_D. \end{cases} \quad (7.24)$$

A partir de la relación tensión-deformación (7.19), se obtiene el tensor de tensiones en $\tau = 1$:

$$\boldsymbol{\sigma}(1) = Cyh(y) \begin{pmatrix} \nu & 0 & 0 \\ 0 & 1 - \nu & 0 \\ 0 & 0 & \nu \end{pmatrix}. \quad (7.25)$$

A continuación, comparamos los resultados numéricos con los analíticos para la variable de daño.

En la Figura 7.2 se representan las distribuciones de daño numérica y analítica, teniendo en cuenta que, al no depender de la coordenada z , basta con una representación bidimensional en un cierto plano, habiendo escogido $z = 10$.

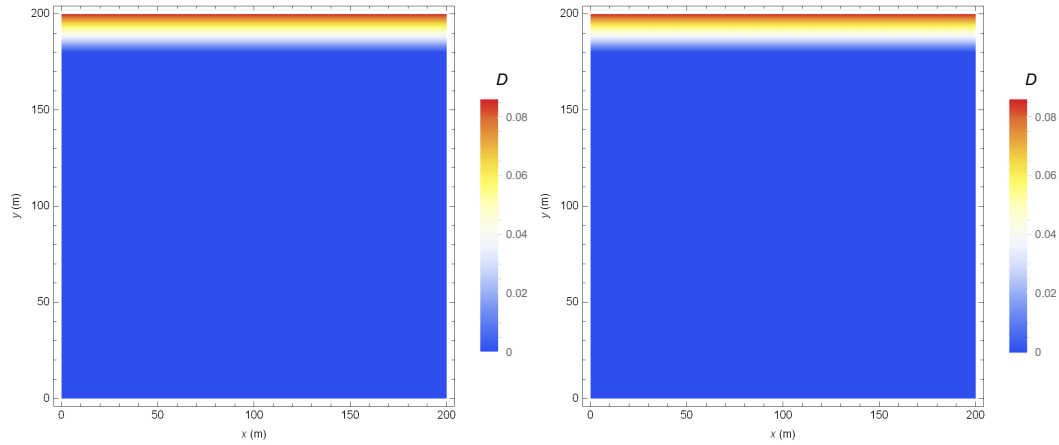


Figura 7.2: Distribución analítica de daño (izquierda) y distribución numérica de daño (derecha).

En la Figura 7.3 podemos visualizar la dependencia de las distribuciones de daño numérica y analítica a lo largo de la coordenada y .

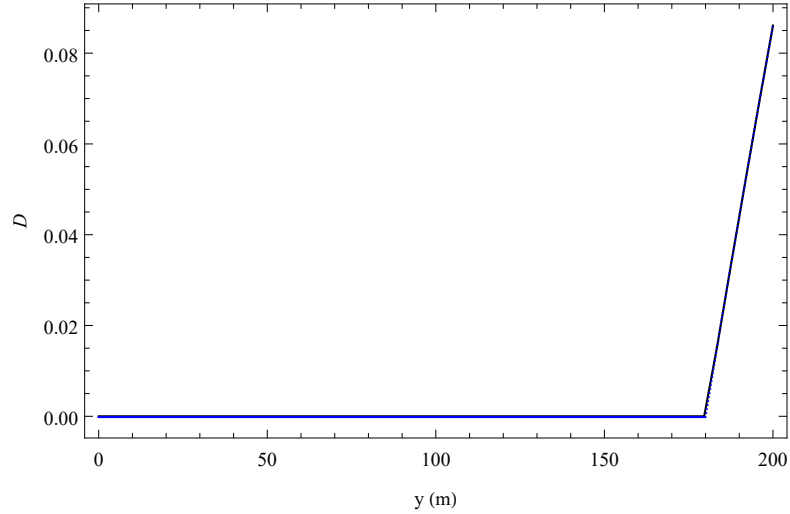


Figura 7.3: Dependencia con la coordenada y de la variable de daño analítica (línea negra) y de la numérica (puntos azules).

Los resultados numéricos obtenidos presentan los siguientes errores relativos en norma 2 en el instante $\tau = 1$:

Magnitud	Error
\vec{u}	6.3×10^{-8}
ε	2.2×10^{-6}
σ	3.7×10^{-6}
D	1.0×10^{-4}

Tabla 7.3: Errores relativos obtenidos para \vec{u} , ε , σ y D .

Dado que el campo de desplazamientos es lineal en el Test 1 y no lineal en el Test 2, cabría esperar errores relativos menores en el primer caso. Esto no es así debido a que la presencia de daño hace aumentar los errores cometidos en la simulación numérica. En el Test 1 toda la placa está sometida a daño en el instante $\tau = 1$, mientras que en el Test 2 solo una pequeña parte está dañada. Por tanto, la extensa distribución de daño del Test 1 implica un aumento global de los errores.

7.3.5. Test 3: Modelo termomecánico con daño. Temperatura lineal

Modelo termomecánico con daño

Con el objetivo de tener un campo de temperaturas estacionario, se resuelve el siguiente problema:

$$\begin{cases} \text{Div}(\kappa \nabla \theta) = 0 & \text{en } \Omega_s, \\ \theta = 600 \text{ }^\circ\text{C} & \text{sobre } \Gamma_1, \\ \theta = 1200 \text{ }^\circ\text{C} & \text{sobre } \Gamma_2, \\ \kappa \frac{\partial \theta}{\partial \vec{n}} = 0 & \text{sobre } \bigcup_{i=3}^6 \Gamma_i. \end{cases} \quad (7.26)$$

Se puede comprobar fácilmente que la solución analítica para el campo de temperaturas viene dada por:

$$\theta(x, y, z) = \theta(x) = 600 + 3x. \quad (7.27)$$

Modelo mecánico

Para calcular la solución analítica de la variable de daño, comenzamos calculando el tensor de deformaciones térmico, ε^{th} , a partir de (7.27):

$$\varepsilon^{th}(x) = \alpha(\theta(x) - \theta_0) \mathbf{I} = \alpha(580 + 3x) \mathbf{I}, \quad (7.28)$$

donde consideramos la temperatura de referencia $\theta_0 = 20 \text{ }^\circ\text{C}$.

El problema mecánico con daño que se plantea es el siguiente:

$$\left\{ \begin{array}{ll} -\text{Div}(\boldsymbol{\sigma}) = \vec{0} & \text{en } \Omega_s \times (0, 1], \\ \boldsymbol{\sigma} = \frac{(1-D)E}{(1+\nu)(1-2\nu)} [\nu \text{tr}(\boldsymbol{\varepsilon}(\vec{u})) \mathbf{I} + (1-2\nu)\boldsymbol{\varepsilon}(\vec{u}) - \alpha(\theta - \theta_0)(1+\nu)\mathbf{I}] & \text{en } \Omega_s \times (0, 1], \\ D = 1 - \frac{\varepsilon_{D_0}}{K}(1-A) - A \exp[-B(K - \varepsilon_{D_0})] & \text{en } \Omega_s \times (0, 1], \\ \dot{K} \geq 0, \quad \bar{\varepsilon}_{corr} - K \leq 0, \quad \dot{K}(\bar{\varepsilon}_{corr} - K) = 0 & \text{en } \Omega_s \times (0, 1], \\ u_x = -\frac{3}{2}\alpha(y^2 + z^2)\tau & \text{sobre } \Gamma_1 \times (0, 1], \\ u_y = 0 & \text{sobre } \Gamma_3 \times (0, 1], \\ u_z = 0 & \text{sobre } \Gamma_5 \times (0, 1], \\ \boldsymbol{\sigma}\vec{n} = \vec{0} & \text{sobre } \Gamma_2 \times (0, 1], \\ \boldsymbol{\sigma}\vec{n} = \vec{0} & \text{sobre } \Gamma_4 \times (0, 1], \\ \boldsymbol{\sigma}\vec{n} = \vec{0} & \text{sobre } \Gamma_6 \times (0, 1]. \\ \vec{u}(0) = \vec{0}, \quad \boldsymbol{\sigma}(0) = \mathbf{0} & \text{en } \Omega_s, \\ K(0) = \varepsilon_{D_0} & \text{en } \Omega_s. \end{array} \right. \quad (7.29)$$

En este test no imponemos ninguna carga mecánica, por lo que no existe deformación elástica, solamente térmica. Consecuentemente, se tiene:

$$\boldsymbol{\varepsilon} = \boldsymbol{\varepsilon}^{th} \Leftrightarrow \boldsymbol{\sigma} = \mathbf{0}, \quad (7.30)$$

de forma que la ecuación de equilibrio en (7.29) se verifica trivialmente, al no producirse ninguna tensión mecánica y en ausencia de fuerzas volúmicas.

Se puede comprobar, a partir de (5.10) y (7.28), que el campo de desplazamientos que verifica las condiciones de contorno anteriores viene dado, en $\tau = 1$, por:

$$\left\{ \begin{array}{l} u_x(x, y, z, 1) = \alpha \left(580x + \frac{3}{2}x^2 \right) - \frac{3}{2}\alpha(y^2 + z^2), \\ u_y(x, y, z, 1) = \alpha(580y + 3xy), \\ u_z(x, y, z, 1) = \alpha(580z + 3xz). \end{array} \right. \quad (7.31)$$

Una vez se tiene el tensor de deformaciones, procedemos a calcular la deformación equivalente y, a continuación, la variable de daño. En primer lugar, como las tensiones son nulas, en todo punto se tendrá $\gamma = 1$ (5.60) y $r = 1$ (5.68), de modo que en (5.65) y (5.66) se obtiene $A = A_t$ y $B = B_t$. Es importante señalar que, de utilizar el modelo de Mazars sin deformaciones térmicas (el implementado por defecto en Code Aster), la deformación equivalente sería siempre nula y no superaría el umbral inicial de daño, siendo la variable interna de daño siempre nula.

Dada la expresión de la deformación térmica (7.28) y el hecho de que la coordenada x es siempre positiva, se tendrá que los valores principales del tensor de deformaciones son siempre positivos. Es decir, la deformación equivalente corregida

en $\tau = 1$ es (véase (5.69)):

$$\bar{\varepsilon}_{corr}(1) = \gamma \sqrt{\sum_{i=1}^3 \langle \varepsilon_i \rangle_+^2} = \sqrt{3 (\varepsilon_i^{th})^2} = \sqrt{3} \alpha (580 + 3x). \quad (7.32)$$

A continuación, calculamos la máxima deformación equivalente alcanzada en $\tau = 1$, K , dada por (5.63):

$$K(1) = \max \left\{ \varepsilon_{D_0}, \max_{0 \leq s \leq 1} [\bar{\varepsilon}_{corr}(s)] \right\} = \max \{ \varepsilon_{D_0}, \bar{\varepsilon}_{corr}(1) \}. \quad (7.33)$$

Mientras K no sea mayor que ε_{D_0} no se producirá daño. La coordenada x_D a partir de la que comienza a producirse daño ($D > 0$) será solución de la ecuación $K(1) = \varepsilon_{D_0}$. Entonces, se tiene:

$$K(1) = \sqrt{3} \alpha (580 + 3x) = \varepsilon_{D_0} = 2 \times 10^{-4} \Rightarrow x_D = \frac{1}{3} \left(\frac{2000}{3} \sqrt{3} - 580 \right) \approx 191.57 \text{ m}. \quad (7.34)$$

En consecuencia, la variable de daño vendrá dada por:

$$D(1) = \begin{cases} 0 & \text{si } x \leq x_D, \\ 1 - \exp \left\{ -9000 \left[\sqrt{3} \alpha (580 + 3x) - 2 \times 10^{-4} \right] \right\} & \text{si } x > x_D. \end{cases} \quad (7.35)$$

A continuación, comparamos los resultados analíticos con los obtenidos en la simulación numérica para $\tau = 1$. Para la distribución de daño se observa un aumento de la variable de daño proporcional a la coordenada x , con independencia de y y de z , como cabría esperar.

En la Figura 7.4 se representan las distribuciones de daño numérica y analítica para el plano $z = 10$.

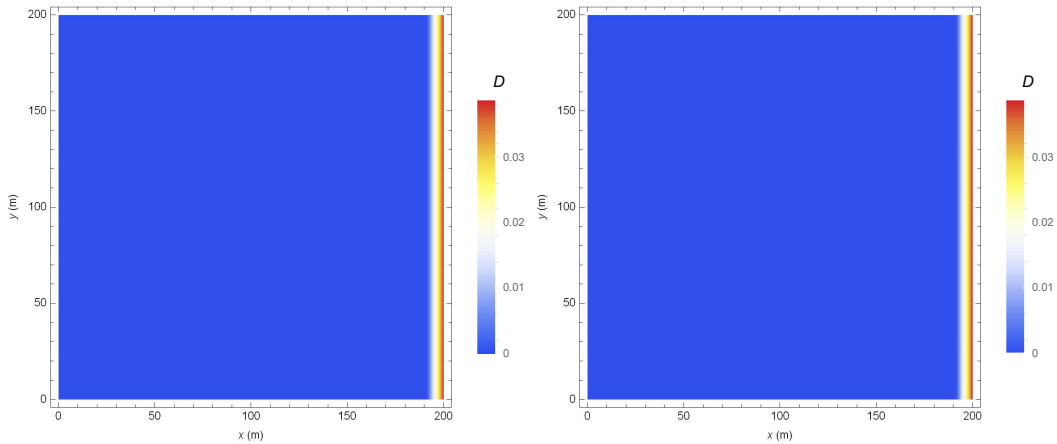


Figura 7.4: Distribución analítica de daño (izquierda) y distribución numérica de daño (derecha).

En la Figura 7.5 se puede apreciar más claramente cómo es la dependencia de la variable de daño con la coordenada x , a lo largo de una línea con y y z constantes:

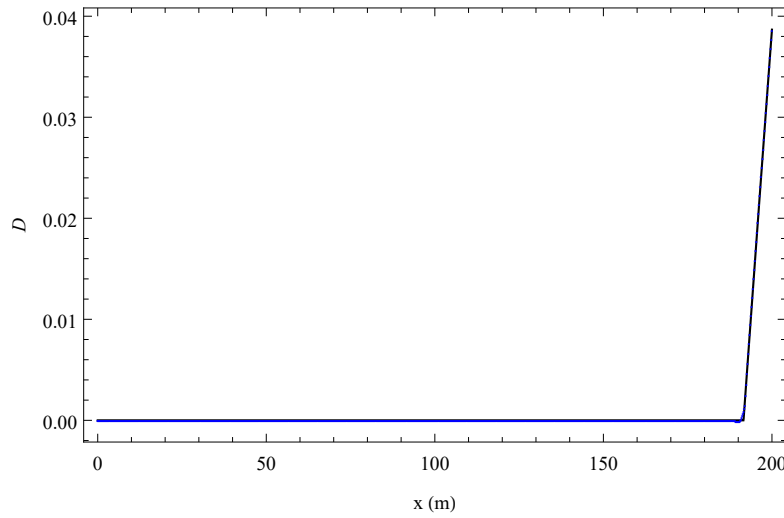


Figura 7.5: Dependencia con la coordenada y de la variable de daño analítica (línea negra) y de la numérica (puntos azules).

Además, se tienen los siguientes errores para los resultados numéricos respecto del cálculo teórico:

Magnitud	Error
θ	6.7×10^{-17}
\vec{u}	2.2×10^{-15}
ε	2.6×10^{-14}
D	9.4×10^{-3}
σ	$1.2 \times 10^{-4} \text{ N m}^{-2}$

Tabla 7.4: Errores relativos obtenidos para θ , \vec{u} , ε y D . En este test se considera el error absoluto en norma 2 para σ , puesto que teóricamente todas sus componentes son idénticamente nulas y el error relativo no estaría bien definido.

Es importante notar que según nos alejamos de la zona de comienzo de daño ($x = x_D$) los errores relativos para D en cada nodo son cada vez menores. Es un comportamiento común a todos los test, ya que en esa parte la solución numérica es más sensible a pequeñas fluctuaciones, pues tiene lugar la transición desde el régimen de comportamiento termoelástico al termoelástico con daño.

7.3.6. Test 4: Modelo termomecánico con daño. Temperatura no lineal

Modelo térmico

Una prueba más complicada para el modelo sería considerar un campo de temperaturas no lineal, que conllevaría la no linealidad de las deformaciones y del

campo de desplazamientos. Por tanto, con esta finalidad, se plantea el siguiente problema térmico estacionario:

$$\left\{ \begin{array}{ll} \text{Div}(\kappa \nabla \theta) = 0 & \text{en } \Omega_s, \\ \theta = 600 \text{ }^\circ\text{C} & \text{sobre } \Gamma_1, \\ \theta = 8y \text{ }^\circ\text{C} & \text{sobre } \Gamma_2, \\ \kappa \frac{\partial \theta}{\partial \vec{n}} = -\frac{8x}{200} & \text{sobre } \Gamma_3, \\ \kappa \frac{\partial \theta}{\partial \vec{n}} = \frac{8x}{200} & \text{sobre } \Gamma_4, \\ \kappa \frac{\partial \theta}{\partial \vec{n}} = 0 & \text{sobre } \Gamma_5 \cup \Gamma_6. \end{array} \right. \quad (7.36)$$

La solución analítica para el campo de temperaturas es la siguiente:

$$\theta(x, y, z) = \theta(x, y) = 600 - 3x + \frac{8xy}{200}. \quad (7.37)$$

Modelo termomecánico con daño

Como en el Test 3, calculamos el tensor de deformaciones térmicas, ϵ^{th} , a partir de (7.37):

$$\epsilon^{th}(x, y) = \alpha(\theta(x, y) - \theta_0)\mathbf{I} = \alpha \left(580 - 3x + \frac{8xy}{200} \right) \mathbf{I}, \quad (7.38)$$

donde consideramos la temperatura de referencia $\theta_0 = 20 \text{ }^\circ\text{C}$.

Dada la no linealidad del tensor de deformaciones y su dependencia funcional, no se verifican las ecuaciones de compatibilidad de Saint-Venant y no existe un campo de desplazamientos asociado a ese tensor de deformaciones dentro de la teoría de elasticidad lineal.

Como desconocemos el campo de desplazamientos analítico, nos encontramos con la dificultad de imponer una condición de frontera sobre el desplazamiento en una superficie bidimensional del sólido, para que el problema tenga solución única. A costa de provocar una concentración de tensiones en el entorno del punto de bloqueo, fijamos los desplazamientos en una zona suficientemente alejada de la parte del dominio donde va a producirse daño. Se aplica el *Principio de Saint-Venant* (véase [27], Sección 5.1.5), que garantiza, para una zona suficientemente alejada de donde se perturba el problema, la equivalencia entre el sistema mecánico bloqueado de forma ficticia y el sistema mecánico de partida. La zona de bloqueo se escogerá a partir del conocimiento de la distribución analítica de daño, cuyo cálculo mostraremos posteriormente.

Elegimos como zona de bloqueo la cara lateral exterior del elemento de malla situado lo más cerca posible de la esquina entre las fronteras Γ_1 y Γ_3 , perteneciente a la primera de ellas. Es decir, bloqueamos los desplazamientos en el entorno del punto de coordenadas $(0, 0, 5)$, y denotamos esta zona de bloqueo como $\mathcal{E}_1 \subset \Gamma_1$.

De esta forma, el problema mecánico con daño a resolver es:

$$\left\{ \begin{array}{ll} -\text{Div}(\boldsymbol{\sigma}) = \vec{0} & \text{en } \Omega_s \times (0, 1], \\ \boldsymbol{\sigma} = \frac{(1-D)E}{(1+\nu)(1-2\nu)} [\nu \text{tr}(\boldsymbol{\varepsilon}(\vec{u})) \mathbf{I} + (1-2\nu)\boldsymbol{\varepsilon}(\vec{u}) - \alpha(\theta - \theta_0)(1+\nu)\mathbf{I}] & \text{en } \Omega_s \times (0, 1], \\ D = 1 - \frac{\varepsilon_{D_0}}{K}(1-A) - A \exp[-B(K - \varepsilon_{D_0})] & \text{en } \Omega_s \times (0, 1], \\ \dot{K} \geq 0, \quad \bar{\varepsilon}_{corr} - K \leq 0, \quad \dot{K}(\bar{\varepsilon}_{corr} - K) = 0 & \text{en } \Omega_s \times (0, 1], \\ \vec{u} = \vec{0} & \text{sobre } \mathcal{E}_1 \times (0, 1], \\ \boldsymbol{\sigma} \vec{n} = \vec{0} & \text{sobre } \partial\Omega_s \setminus \mathcal{E}_1 \times (0, 1], \\ \vec{u}(0) = \vec{0}, \quad \boldsymbol{\sigma}(0) = \mathbf{0} & \text{en } \Omega_s, \\ K(0) = \varepsilon_{D_0} & \text{en } \Omega_s. \end{array} \right. \quad (7.39)$$

Como no existen cargas mecánicas aplicadas, la deformación elástica es nula. Por tanto, se tendrá:

$$\boldsymbol{\varepsilon} = \boldsymbol{\varepsilon}^{th} \Leftrightarrow \boldsymbol{\sigma} = \mathbf{0}, \quad (7.40)$$

verificándose trivialmente la ecuación de equilibrio en (7.39), en ausencia de tensiones mecánicas y fuerzas volúmicas.

Obsérvese que en el entorno de la zona de bloqueo, \mathcal{E}_1 , podrían producirse tensiones no nulas y en consecuencia daño, debido a la concentración de tensiones en esa área. Por tanto, cabría esperar concordancia entre la solución analítica y la solución numérica lejos del entorno de la zona de bloqueo.

Seguidamente, se calcula la deformación equivalente y a continuación el daño. En la resolución analítica, asumiendo que las tensiones son nulas, se tiene $\gamma = 1$ y $r = 1$ (véanse (5.60) y (5.68)), de modo que $A = A_t$ y $B = B_t$ (véanse (5.65) y (5.66)). En este caso no es tan obvia la separación entre las zonas con deformación positiva y negativa, sino que esta vendrá dada por una cierta condición en el plano XY . Es decir, se tiene que la deformación equivalente corregida en $\tau = 1$ es, a partir de (5.69):

$$\bar{\varepsilon}_{corr}(1) = \begin{cases} 0 & \text{si } h(x, y) \leq 0, \\ \gamma \sqrt{\sum_{i=1}^3 \langle \varepsilon_i \rangle_+^2} = \sqrt{3(\varepsilon_i^{th})^2} = \sqrt{3}\alpha \left(580 - 3x + \frac{8xy}{200} \right) & \text{si } h(x, y) > 0, \end{cases} \quad (7.41)$$

siendo $h(x, y) = 580 - 3x + \frac{8xy}{200}$.

El siguiente paso es calcular la máxima deformación equivalente alcanzada en $\tau = 1$ en cada punto (véase (5.49)):

$$K(1) = \max \left\{ \varepsilon_{D_0}, \max_{0 \leq s \leq 1} [\bar{\varepsilon}_{corr}(1)] \right\}. \quad (7.42)$$

Nuevamente, mientras K no supere el umbral de daño inicial, ε_{D_0} , no se producirá daño. En este caso, el daño se producirá en la zona del dominio dada por la desigualdad $K > \varepsilon_{D_0}$, es decir:

$$\sqrt{3}\alpha h(x, y) > \varepsilon_{D_0} = 2 \times 10^{-4}, \quad (7.43)$$

no produciéndose daño en el resto de la placa.

Por tanto, en la zona susceptible de daño, D viene dada por (ver Tabla 7.1):

$$D(1) = \begin{cases} 0 & \text{si } \sqrt{3}\alpha h(x, y) \leq 2 \times 10^{-4}, \\ 1 - \exp \left\{ -9000 \left[\sqrt{3} \times 10^{-7} h(x, y) - 2 \times 10^{-4} \right] \right\} & \text{si } \sqrt{3}\alpha h(x, y) > 2 \times 10^{-4}. \end{cases} \quad (7.44)$$

En la Figura 7.6 se observan las distribuciones de daño numérica y analítica, teniendo en cuenta que, al no depender de la coordenada z , basta con una representación bidimensional en un cierto plano, habiendo escogido $z = 10$. A diferencia de los casos anteriores, la variable de daño sí depende de dos coordenadas: la x y la y .

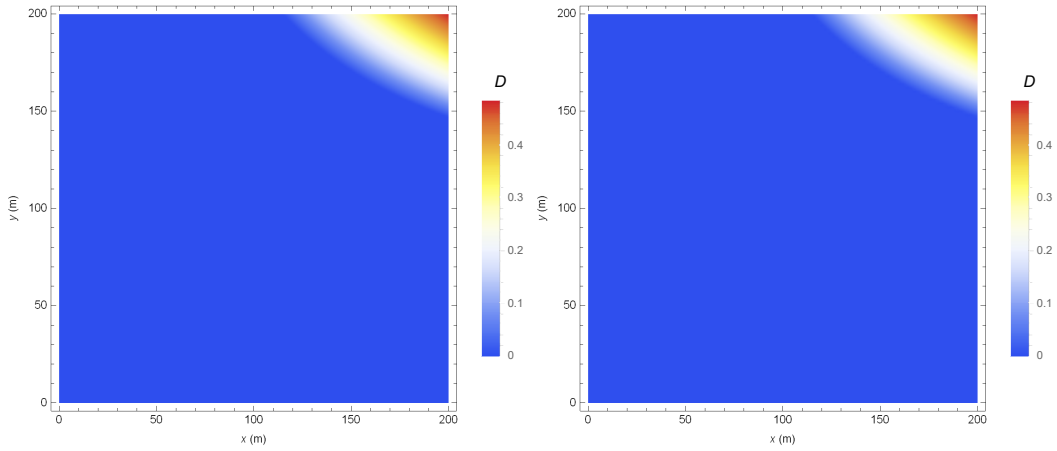


Figura 7.6: Distribución analítica de daño (izquierda) y distribución numérica de daño (derecha).

En la Figura 7.7 se representa la variable de daño en el mismo plano $z = 10$ a lo largo del segmento con $x = y$:

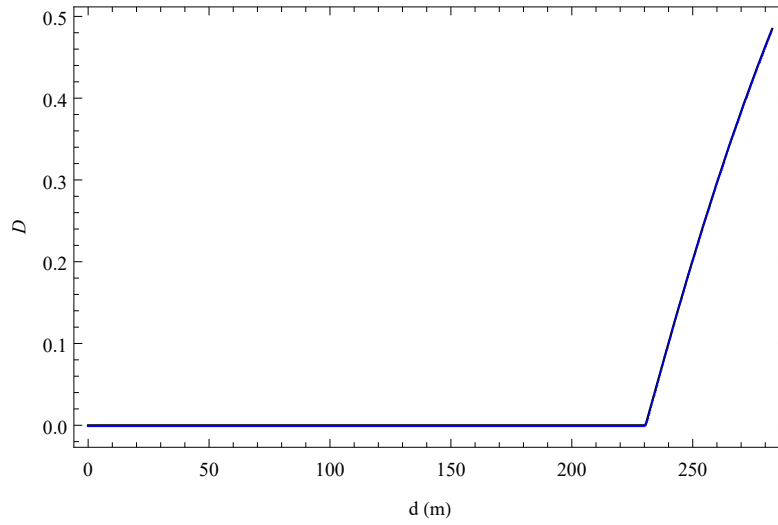


Figura 7.7: Dependencia con la distancia recorrida sobre la curva $x = y$ de la variable de daño analítica (línea negra) y de la numérica (puntos azules).

Los errores para los resultados numéricos respecto de los valores teóricos se calculan en la zona del dominio dada por $x > 100$ m e $y > 100$ m, lejos del área de bloqueo ficticio, \mathcal{E}_1 . En esta zona, los errores relativos en norma 2 son:

Magnitud	Error
θ	1.0×10^{-16}
ε	1.0×10^{-4}
D	1.2×10^{-3}

Tabla 7.5: Errores relativos obtenidos para θ , ε y D . No se incluye el error para \vec{u} porque no conocemos el campo de desplazamientos analítico.

Se considera el error absoluto en norma 2 para σ , puesto que teóricamente todas sus componentes son idénticamente nulas y el error relativo no estaría bien definido. Se obtiene un error absoluto en norma 2 para σ de $7.3 \times 10^4 \text{ N m}^{-2}$. El alto valor que toma el error absoluto para σ es producto del bloqueo llevado a cabo en el elemento \mathcal{E}_1 , que produce tensiones no contempladas en la solución analítica.

7.3.7. Test 5: Modelo termomecánico con daño. Tensión no nula.

En este caso se incluyen deformaciones térmicas y mecánicas, a fin de verificar la respuesta de la variable de daño a la combinación de ambos tipos de deformación.

Modelo térmico

Con el objetivo de tener un campo de temperaturas estacionario, se resuelve el siguiente problema:

$$\begin{cases} \text{Div}(\kappa \nabla \theta) = 0 & \text{en } \Omega_s, \\ \theta = 600 \text{ } ^\circ\text{C} & \text{sobre } \Gamma_1, \\ \theta = 1600 \text{ } ^\circ\text{C} & \text{sobre } \Gamma_2, \\ \kappa \frac{\partial \theta}{\partial \vec{n}} = 0 & \text{sobre } \bigcup_{i=3}^6 \Gamma_i. \end{cases} \quad (7.45)$$

Se puede comprobar fácilmente que la solución analítica para el campo de temperaturas viene dada por:

$$\theta(x, y, z) = \theta(x) = 600 + 5x. \quad (7.46)$$

Modelo termomecánico con daño

El tensor de deformaciones térmicas viene dado por:

$$\varepsilon^{th}(x) = \alpha(\theta(x) - \theta_0) \mathbf{I} = \alpha(580 + 5x) \mathbf{I}, \quad (7.47)$$

donde consideramos la temperatura de referencia $\theta_0 = 20 \text{ } ^\circ\text{C}$.

Sea \vec{f} la densidad de fuerzas de volumen siguiente:

$$\vec{f} = \begin{cases} -5C(1 - \nu) \vec{e}_1 & \text{si } x \leq x_D, \\ -5C(1 - \nu) [1 - g(x)] \exp[-g(x) + 1.8] \vec{e}_1 & \text{si } x > x_D, \end{cases}$$

donde

$$C = \frac{E\alpha}{10(1 + \nu)(1 - 2\nu)}, \quad (7.48)$$

$$g(x) = 900\sqrt{321} \alpha (580 + 5x),$$

y

$$x_D = \frac{1}{5} \left(\frac{2 \times 10^4}{\sqrt{321}} - 580 \right) \approx 107.26 \text{ m.}$$

Sea $h(x)$ la función definida a trozos:

$$h(x) = \begin{cases} 1 & \text{si } x \leq x_D, \\ \exp[-g(x) + 1.8] & \text{si } x > x_D. \end{cases} \quad (7.49)$$

Entonces, se considera el problema elástico con daño:

$$\left\{ \begin{array}{ll} -\text{Div}(\boldsymbol{\sigma}) = \vec{f}\tau & \text{en } \Omega_s \times (0, 1], \\ \boldsymbol{\sigma} = \frac{(1-D)E}{(1+\nu)(1-2\nu)} [\nu \text{tr}(\boldsymbol{\varepsilon}(\vec{u})) \mathbf{I} + (1-2\nu)\boldsymbol{\varepsilon}(\vec{u}) - \alpha(\theta - \theta_0)(1+\nu)\mathbf{I}] & \text{en } \Omega_s \times (0, 1], \\ D = 1 - \frac{\varepsilon_{D_0}}{K}(1-A) - A \exp[-B(K - \varepsilon_{D_0})] & \text{en } \Omega_s \times (0, 1], \\ \dot{K} \geq 0, \quad \bar{\varepsilon}_{corr} - K \leq 0, \quad \dot{K}(\bar{\varepsilon}_{corr} - K) = 0 & \text{en } \Omega_s \times (0, 1], \\ u_x = -\frac{5}{2}\alpha(y^2 + z^2)\tau & \text{sobre } \Gamma_1 \times (0, 1], \\ u_y = 0 & \text{sobre } \Gamma_3 \times (0, 1], \\ u_z = 0 & \text{sobre } \Gamma_5 \times (0, 1], \\ \boldsymbol{\sigma}\vec{n} = C(1-\nu)(580 + 5 \times 200)h(200)\tau\vec{e}_1 & \text{sobre } \Gamma_2 \times (0, 1], \\ \boldsymbol{\sigma}\vec{n} = C\nu(580 + 5x)h(x)\tau\vec{e}_2 & \text{sobre } \Gamma_4 \times (0, 1], \\ \boldsymbol{\sigma}\vec{n} = C\nu(580 + 5x)h(x)\tau\vec{e}_3 & \text{sobre } \Gamma_6 \times (0, 1], \\ \vec{u}(0) = \vec{0}, \quad \boldsymbol{\sigma}(0) = \mathbf{0} & \text{en } \Omega_s, \\ K(0) = \varepsilon_{D_0} & \text{en } \Omega_s. \end{array} \right. \quad (7.50)$$

Se puede comprobar que el campo de desplazamientos solución de (7.50), para $\tau = 1$, viene dado por:

$$\left\{ \begin{array}{l} u_x(x, y, z, 1) = \frac{11}{10}\alpha(580x + \frac{5}{2}x^2) - \frac{5}{2}\alpha(y^2 + z^2), \\ u_y(x, y, z, 1) = \alpha(580y + 5xy), \\ u_z(x, y, z, 1) = \alpha(580z + 5xz). \end{array} \right. \quad (7.51)$$

Para comprobar que este campo es solución de (7.50), comenzamos calculando el tensor de deformaciones a través de (5.10):

$$\boldsymbol{\varepsilon}(1) = \boldsymbol{\varepsilon}^e + \boldsymbol{\varepsilon}^{th} = \alpha(580 + 5x) \begin{pmatrix} \frac{11}{10} & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}. \quad (7.52)$$

Una vez obtenido el tensor de deformaciones, estamos en disposición de calcular la deformación equivalente y, a continuación, la variable de daño. Como la coordenada x siempre toma valores no negativos, estamos en un caso de tracción pura, con lo cual se tendrá en todo punto $\gamma = 1$ (5.60) y $r = 1$ ((5.68)). En consecuencia, las relaciones (5.65) y (5.66) implican que $A = A_t$ y $B = B_t$.

En vista de lo anterior, la deformación equivalente corregida es (véase (5.69)):

$$\bar{\varepsilon}_{corr}(1) = \gamma \sqrt{\sum_{i=1}^3 \langle \varepsilon_i \rangle_+^2} = \sqrt{\left(\frac{11}{10}\right)^2 + 1^2 + 1^2} \alpha(580 + 5x) = \frac{\sqrt{321}}{10} \alpha(580 + 5x). \quad (7.53)$$

El valor que toma la máxima deformación equivalente alcanzada, K , dada por (5.63), depende de la coordenada x , de forma que si K no es mayor que ε_{D_0} no

se produce daño en el material. La coordenada x_D a partir de la cual comienza a producirse daño es solución de la igualdad $K = \varepsilon_{D_0}$. Por tanto, se tiene:

$$\frac{\sqrt{321}}{10} \alpha (580 + 5x_D) = \varepsilon_{D_0} = 2 \times 10^{-4} \Rightarrow x_D = \frac{1}{5} \left(\frac{2 \times 10^4}{\sqrt{321}} - 580 \right) \approx 107.26 \text{ m}, \quad (7.54)$$

de forma que el daño comienza a partir de $x_D \approx 107.26 \text{ m}$.

En consecuencia, la variable de daño viene dada por:

$$D(1) = \begin{cases} 0 & \text{si } x \leq x_D, \\ 1 - \exp \left[-9000 \left(\frac{\sqrt{321}}{10} \alpha (580 + 5x) - 2 \times 10^{-4} \right) \right] & \text{si } x > x_D. \end{cases} \quad (7.55)$$

A partir de la relación tensión-deformación (7.50), se obtiene el tensor de tensiones:

$$\sigma(1) = C(580 + 5x) h(x) \begin{pmatrix} 1 - \nu & 0 & 0 \\ 0 & \nu & 0 \\ 0 & 0 & \nu \end{pmatrix}. \quad (7.56)$$

A continuación, comparamos los resultados numéricos con los analíticos para la variable de daño.

En la Figura 7.8 visualizamos una representación bidimensional de las distribuciones de daño numérica y analítica en un cierto plano, en particular, $z = 10$.

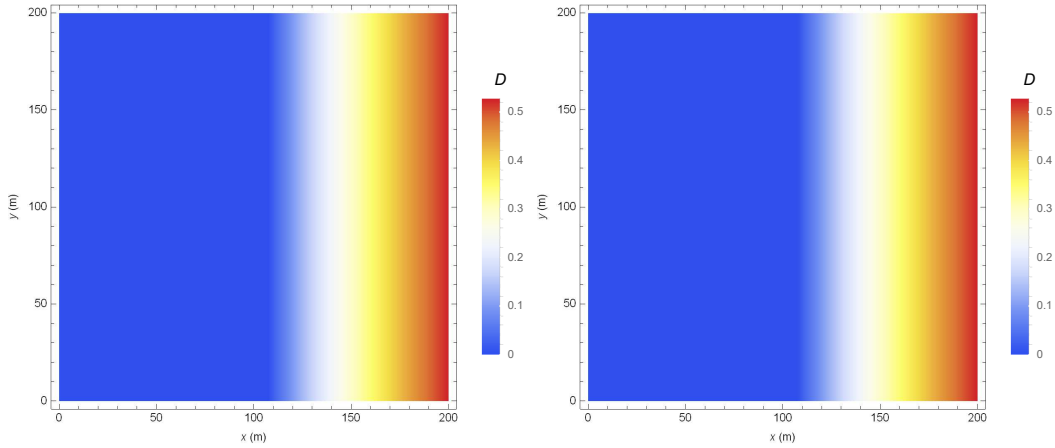


Figura 7.8: Distribución analítica de daño (izquierda) y distribución numérica de daño (derecha).

En la Figura 7.9 podemos visualizar la dependencia de las distribuciones de daño numérica y analítica a lo largo de la coordenada x :

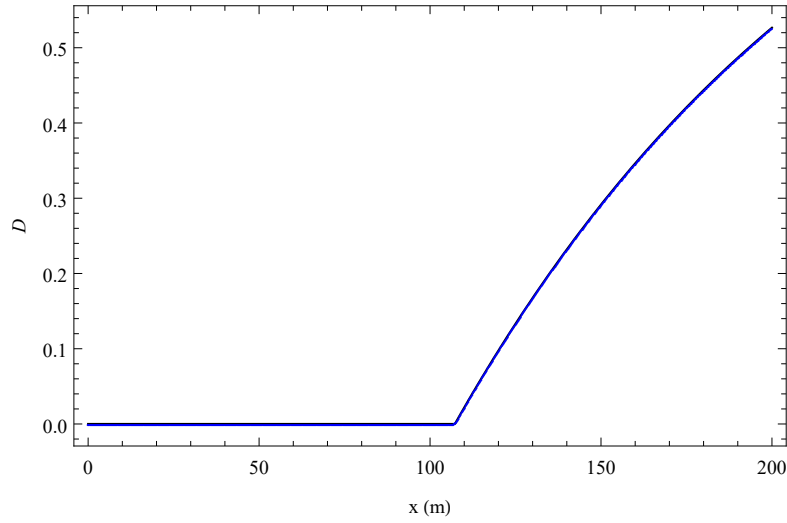


Figura 7.9: Dependencia con la coordenada x de la variable de daño analítica (línea negra) y de la numérica (puntos azules).

Por otro lado, los resultados numéricos obtenidos en $\tau = 1$ presentan los siguientes errores respecto del cálculo teórico:

Magnitud	Error
θ	7.8×10^{-17}
\vec{u}	9.8×10^{-5}
ε	7.0×10^{-5}
σ	1.3×10^{-3}
D	4.8×10^{-4}

Tabla 7.6: Errores relativos obtenidos para θ , \vec{u} , ε , σ y D .

7.4. Problema del canal principal

Una vez hemos comprobado los buenos resultados de la simulación numérica en los diferentes test, nos centramos en el problema sobre el canal principal. En primer lugar, se resuelve el problema mecánico con daño en ausencia de deformaciones térmicas. Posteriormente, partiendo del campo de temperaturas estacionario calculado en [4], se incluyen las deformaciones térmicas en la resolución del problema mecánico con daño.

7.4.1. Geometría y malla

El dominio computacional considerado, Ω_s , corresponde a la mitad final del canal principal. Incluye parte de la ruta de la escoria y del *skimmer*, y tiene una

longitud de 9.5 m (por los 15 m de la estructura real), 3 m de ancho (más 1.5 m en la zona de la ruta de la escoria) y 2 m de altura. En la geometría no se considera la capota que recubre el canal, aunque sí consideraremos su peso, puesto que su función principal es la de mantener el calor en el canal principal y el estudio del daño en esa región carece de interés. Además, de esta manera reducimos el tamaño de la malla y, en consecuencia, los tiempos de cálculo. En los cálculos del problema real empleamos la malla de elementos finitos lineales que nos han proporcionado junto con las temperaturas, compuesta por tetraedros y con 19698 nodos. El tiempo de cálculo de cada simulación es de aproximadamente 20 minutos. El dominio computacional puede verse en la Figura 7.10.

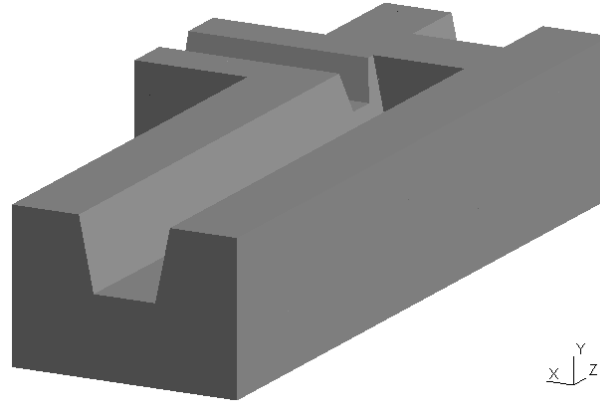


Figura 7.10: Dominio computacional del problema.

La frontera del dominio, $\partial\Omega_s = \bigcup_{i=1}^6 \Gamma_i \cup \Gamma_R$, está compuesta por:

- Γ_1 : la base del canal principal,
- Γ_2 : la parte donde se apoya la cubierta,
- Γ_3 : la zona por donde discurren el arrabio y la escoria,
- Γ_4 : la zona de salida de la ruta de la escoria,
- Γ_5 : la mitad del canal principal,
- Γ_6 : la parte final del canal, detrás del *skimmer*,
- Γ_R : las demás fronteras.

A continuación, se muestran las fronteras del problema:

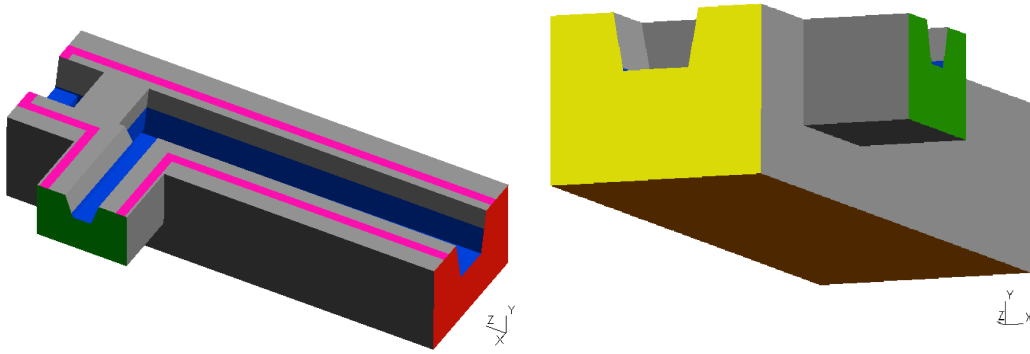


Figura 7.11: Visualización de las diferentes fronteras del problema: Γ_1 (marrón), Γ_2 (rosa), Γ_3 (azul), Γ_4 (verde), Γ_5 (rojo) y Γ_6 (amarillo). El resto de las fronteras, Γ_R , se muestran en color gris.

En las diferentes fronteras se aplican las condiciones de contorno detalladas en la Sección 7.4.3.

7.4.2. Parámetros

En estos momentos, la empresa no dispone de parámetros termoelásticos experimentales para los diferentes materiales presentes en el problema del canal principal. De hecho, actualmente está realizando una campaña de medidas, y, aunque esperaban disponer de los parámetros termoelásticos en el mes de junio, finalmente no ha sido posible. Por ello, se utilizan valores representativos del hormigón refractario presente en el canal. Puesto que no tenemos datos reales para los diferentes tipos de hormigón existentes en el dominio ni para el recubrimiento exterior de acero, asumimos que todo el sólido está formado por un único material, con las características del hormigón. Los parámetros empleados en la simulación del problema pueden verse en la Tabla 7.7.

En la resolución sin deformación térmica, que tiene lugar a temperatura ambiente, y donde se tienen en cuenta únicamente las cargas mecánicas, tomamos como deformación umbral de daño $\varepsilon_{D_0} = 9 \times 10^{-5}$, un valor similar a los empleados en los test.

Como ya hemos comentado, los parámetros del modelo son en realidad dependientes de la temperatura, que toma un amplio rango de valores en el canal principal. Si mantuviésemos el mismo umbral de deformación del problema elástico a temperatura ambiente para el caso con deformaciones térmicas, dadas las elevadas temperaturas, la práctica totalidad del canal tendría asociado un valor de daño muy elevado, ya que las deformaciones son mucho mayores que en el caso únicamente elástico. Este comportamiento no sería realista, sobre todo lejos de la zona de temperaturas más elevadas, por lo que parece razonable asumir que la deformación umbral de daño es creciente con la temperatura. Es decir, para el problema con deformación térmica, por tener lugar a temperaturas considerablemente más elevadas, tomamos un valor de $\varepsilon_{D_0} = 9 \times 10^{-3}$. A pesar de nuestro desconocimiento de los parámetros reales del problema, aspiramos a obtener resultados cualitativos

para la variable de daño. Para los demás parámetros del modelo de Mazars se utilizan los valores constantes empleados en los test.

Parámetro	Valor	Parámetro	Valor
E	10^9 Pa	A_t	1
ν	0.2	B_c	10^3
A_c	1.4	B_t	9×10^3
k	0.7	ε_{D_0}	9×10^{-5} (Temperatura ambiente) 9×10^{-3} (Temperatura elevada)
α	5.3×10^{-6} °C $^{-1}$	ρ	3210 kg m $^{-3}$

Tabla 7.7: Parámetros empleados en la resolución numérica.

7.4.3. Cargas aplicadas y condiciones de contorno

Fuerza de la gravedad

Todo el dominio Ω_s está sometido a la fuerza de la gravedad, de forma que la densidad de fuerzas volúmicas, \vec{f} , viene dada por:

$$\vec{f} = -\rho g \vec{e}_2, \quad (7.57)$$

donde $g \approx 9.8$ m s $^{-2}$ es la aceleración de la gravedad.

Presión ejercida por la cubierta

En lugar de incluir la cubierta del canal en la geometría, imponemos una presión P sobre Γ_2 equivalente al peso de la capota distribuido uniformemente sobre el área de esa frontera. Dado que la cubierta está compuesta por dos capas, una de hormigón y otra de acero, para calcular su peso utilizamos las densidades $\rho_H = 3210$ kg m $^{-3}$ para el hormigón y $\rho_A = 7850$ kg m $^{-3}$ para el acero. En este último caso, el valor corresponde a un acero de la serie AISI 4000 (véase [28]). El volumen ocupado por el hormigón en la capota es de $V_H \approx 4.6243$ m 3 y el de acero es $V_A \approx 1.7369$ m 3 . Por tanto, como el área de Γ_2 es $A_2 \approx 4.3568$ m 2 , la magnitud de la presión P viene dada por:

$$P = \frac{g}{A_2} (\rho_A V_A + \rho_H V_H) \approx 6.40587 \times 10^4 \text{ N m}^{-2}, \quad (7.58)$$

aplicada en la dirección $-\vec{e}_2$.

Presión ejercida por los fluidos

Por otra parte, debemos tener en cuenta la presión ejercida por la escoria y el arrabio sobre el hormigón del canal en la frontera Γ_3 . La presión en cada punto de Γ_3 será diferente en función del valor de la coordenada y , puesto que la masa de

fluido que hay encima varía. Se distinguen tres zonas de presión: por debajo de la superficie libre entre arrabio y escoria, por encima de la superficie libre entre arrabio y escoria pero sin alcanzar el aire y por encima de la superficie libre entre escoria y aire. Por tanto, la magnitud de la presión $h(y)$ ejercida por la escoria y el arrabio sobre Γ_3 es:

$$h(y) = \begin{cases} [\rho_E(y_E - y_M) + \rho_M(y_M - y)]g & \text{si } y < y_M, \\ \rho_E(y_E - y)g & \text{si } y_M \leq y \leq y_E, \\ 0 & \text{si } y > y_E, \end{cases} \quad (7.59)$$

siendo:

- $\rho_M = 7015 \text{ kg m}^{-3}$ la densidad del arrabio,
- $\rho_E = 2600 \text{ kg m}^{-3}$ la densidad de la escoria,
- $y_M \approx 0.1565 \text{ m}$ la altura alcanzada por el arrabio,
- $y_E \approx 0.5435 \text{ m}$ la altura alcanzada por la escoria.

Los valores de y_M e y_E se obtienen a partir del modelo hidrodinámico resuelto en [4].

Si introducimos estos valores numéricos en (7.59) tenemos:

$$h(y) = \begin{cases} 20619.7 - 68747y & \text{si } y < 0.1565 \text{ m}, \\ 13848.4 - 25480y & \text{si } 0.1565 \text{ m} \leq y \leq 0.5435 \text{ m}, \\ 0 & \text{si } y > 0.5435 \text{ m}, \end{cases} \quad (7.60)$$

que se aplica en la dirección normal interior a Γ_3 .

Condiciones de simetría

Recordamos que nuestro dominio computacional es la mitad final del canal, puesto que es donde disponemos del campo de temperaturas. Por tanto, en las fronteras de corte, Γ_4 y Γ_5 , debemos imponer una condición de contorno adecuada. Puesto que no se tienen medidas experimentales de desplazamientos ni esfuerzos en esas caras, aproximamos su comportamiento utilizando condiciones de simetría. Por tanto, basándonos en el Principio de Saint Venant, daremos por bueno el comportamiento termomecánico lejos de esas fronteras.

Es decir, en la frontera Γ_5 imponemos $u_z = 0$ y $\vec{\sigma}_t = \vec{0}$, siendo $\vec{\sigma}_t$ la componente tangencial de la tensión. Por otro lado, en la frontera Γ_4 , dado que la escoria continúa su ruta por un canal secundario, también se imponen condiciones de simetría: $u_x = 0$ y $\vec{\sigma}_t = \vec{0}$.

Bloqueo

En la frontera Γ_1 , correspondiente a la base del canal, se imponen condiciones de desplazamiento nulo, de forma que el canal esté apoyado en esa zona. En realidad, el canal se sitúa sobre una serie de vigas transversales, de forma que no toda la parte inferior está fija. En este caso, por simplicidad, asumiremos que toda la base está fijada.

Esfuerzos nulos

En el resto de las fronteras, $\Gamma_6 \cup \Gamma_R$, se imponen esfuerzos nulos.

7.4.4. Resolución del problema mecánico

Si no consideramos las deformaciones térmicas en el canal, el problema mecánico con daño a resolver es:

$$\left\{ \begin{array}{ll} -\text{Div}(\boldsymbol{\sigma}) = \vec{f}\tau & \text{en } \Omega_s \times (0, 1], \\ \boldsymbol{\sigma} = \frac{(1-D)E}{(1+\nu)(1-2\nu)} [\nu \text{tr}(\boldsymbol{\varepsilon}(\vec{u})) \mathbf{I} + (1-2\nu)\boldsymbol{\varepsilon}(\vec{u})] & \text{en } \Omega_s \times (0, 1], \\ D = 1 - \frac{\varepsilon_{D_0}}{K}(1-A) - A \exp[-B(K - \varepsilon_{D_0})] & \text{en } \Omega_s \times (0, 1], \\ \dot{K} \geq 0, \quad \bar{\varepsilon}_{corr} - K \leq 0, \quad \dot{K}(\bar{\varepsilon}_{corr} - K) = 0 & \text{en } \Omega_s \times (0, 1], \\ \vec{u} = \vec{0} & \text{sobre } \Gamma_1 \times (0, 1], \\ u_x = 0, \quad \vec{\sigma}_t = \vec{0} & \text{sobre } \Gamma_4 \times (0, 1], \\ u_z = 0, \quad \vec{\sigma}_t = \vec{0} & \text{sobre } \Gamma_5 \times (0, 1], \\ \boldsymbol{\sigma}\vec{n} = -P\tau\vec{e}_2 & \text{sobre } \Gamma_2 \times (0, 1], \\ \boldsymbol{\sigma}\vec{n} = -h(y)\tau\vec{n} & \text{sobre } \Gamma_3 \times (0, 1], \\ \boldsymbol{\sigma}\vec{n} = \vec{0} & \text{sobre } (\Gamma_6 \cup \Gamma_R) \times (0, 1], \\ \vec{u}(0) = \vec{0} & \text{en } \Omega_s, \\ K(0) = \varepsilon_{D_0} & \text{en } \Omega_s. \end{array} \right. \quad (7.61)$$

La deformación equivalente corregida, $\bar{\varepsilon}_{corr}$, a lo largo del canal principal puede verse en la Figura 7.12.

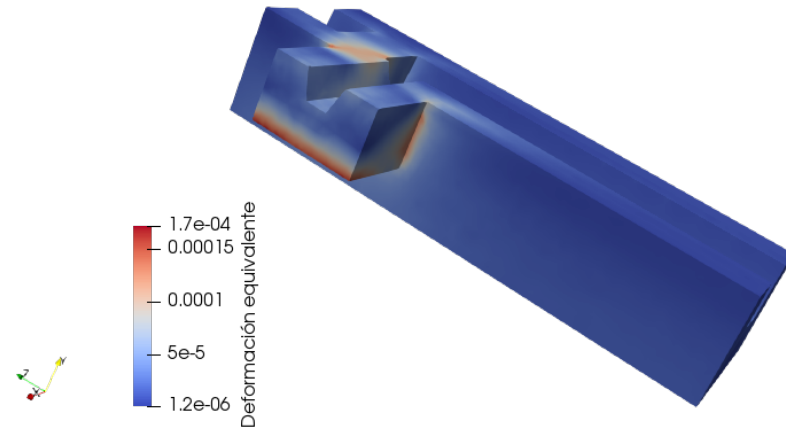


Figura 7.12: Deformación equivalente corregida, $\bar{\epsilon}_{corr}$, a lo largo del canal principal.

La variable de daño, D , se muestra en la Figura 7.13.

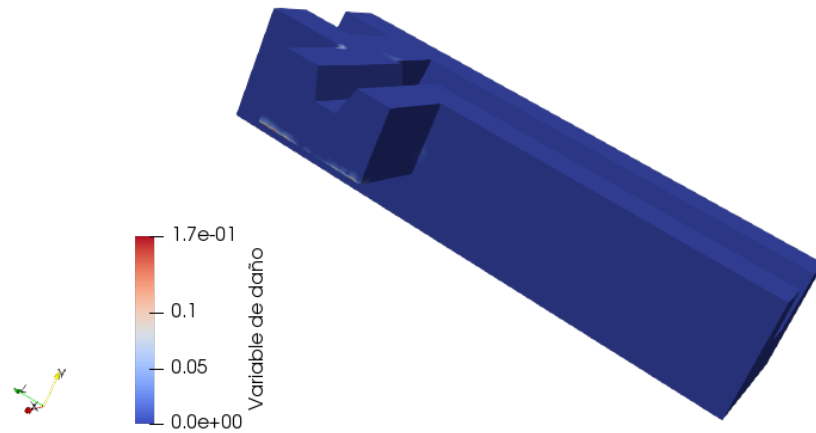


Figura 7.13: Variable de daño, D , a lo largo del canal principal.

En la Figura 7.12 observamos cómo la máxima deformación equivalente corregida se concentra en el entorno de la ruta de la escoria. De hecho, en la Figura 7.13 se muestra el daño en esa zona. Este es el resultado que cabe esperar, en el marco de la resolución numérica llevada a cabo, dado que en esa zona el canal no está apoyado y la acción del peso y las demás cargas provocan importantes deformaciones. En el caso real, toda la estructura está embebida en una capa de acero, que evita los desplazamientos del hormigón en esa zona. Por tanto, no podemos esperar que las cargas mecánicas sobre la estructura contribuyan de forma sustancial a la producción de daño en el canal.

7.4.5. Resolución del problema termomecánico

En la Figura 7.14 presentamos la distribución de temperaturas sobre el canal principal, obtenida en [4].

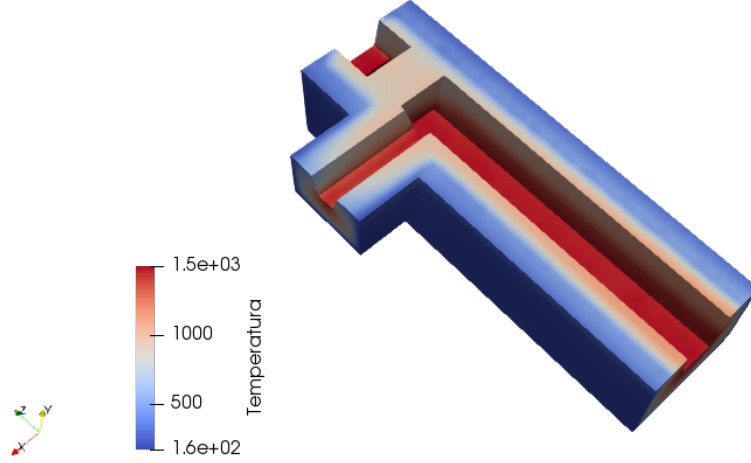


Figura 7.14: Distribución de temperaturas $\theta(x, y, z)$ sobre el canal principal.

Como ya hemos comentado en la Sección 4.3, antes de verter la escoria y el arrabio en el canal principal, este se calienta para mitigar el impacto térmico inicial de la colada. De este modo, la temperatura de referencia en el canal puede alcanzar los 500 °C en la capa de trabajo, por donde discurrirán los fluidos. A pesar de que la temperatura de referencia varía a lo largo del canal, de forma que en las fronteras en contacto con el aire exterior será próxima a la temperatura ambiente, tomaremos como temperatura de referencia constante $\theta_0 = 500$ °C en todo el dominio. Esta es una temperatura de referencia realista para la zona del canal propiamente dicho, por donde discurren los fluidos y es previsible que se produzca el daño en el hormigón.

El problema termomecánico a resolver es el siguiente:

$$\left\{ \begin{array}{ll}
 -\text{Div}(\boldsymbol{\sigma}) = \vec{f}\tau & \text{en } \Omega_s \times (0, 1], \\
 \boldsymbol{\sigma} = \frac{(1-D)E}{(1+\nu)(1-2\nu)} [\nu \text{tr}(\boldsymbol{\varepsilon}(\vec{u})) \mathbf{I} + (1-2\nu)\boldsymbol{\varepsilon}(\vec{u}) - \alpha(\theta - \theta_0)(1+\nu)\mathbf{I}] & \text{en } \Omega_s \times (0, 1], \\
 D = 1 - \frac{\varepsilon_{D_0}}{K}(1-A) - A \exp[-B(K - \varepsilon_{D_0})] & \text{en } \Omega_s \times (0, 1], \\
 \dot{K} \geq 0, \quad \bar{\varepsilon}_{corr} - K \leq 0, \quad \dot{K}(\bar{\varepsilon}_{corr} - K) = 0 & \text{en } \Omega_s \times (0, 1], \\
 \vec{u} = \vec{0} & \text{sobre } \Gamma_1 \times (0, 1], \\
 u_x = 0, \quad \vec{\sigma}_t = \vec{0} & \text{sobre } \Gamma_4 \times (0, 1], \\
 u_z = 0, \quad \vec{\sigma}_t = \vec{0} & \text{sobre } \Gamma_5 \times (0, 1], \\
 \boldsymbol{\sigma}\vec{n} = -P\tau\vec{e}_2 & \text{sobre } \Gamma_2 \times (0, 1], \\
 \boldsymbol{\sigma}\vec{n} = -h(y)\tau\vec{n} & \text{sobre } \Gamma_3 \times (0, 1], \\
 \boldsymbol{\sigma}\vec{n} = \vec{0} & \text{sobre } (\Gamma_6 \cup \Gamma_R) \times (0, 1], \\
 \vec{u}(0) = \vec{0}, \quad \boldsymbol{\sigma}(0) = \mathbf{0} & \text{en } \Omega_s, \\
 K(0) = \varepsilon_{D_0} & \text{en } \Omega_s.
 \end{array} \right. \quad (7.62)$$

La deformación equivalente corregida, $\bar{\varepsilon}_{corr}$, y la variable de daño, D , a lo largo del canal principal, pueden verse en las Figuras 7.15 y 7.16.

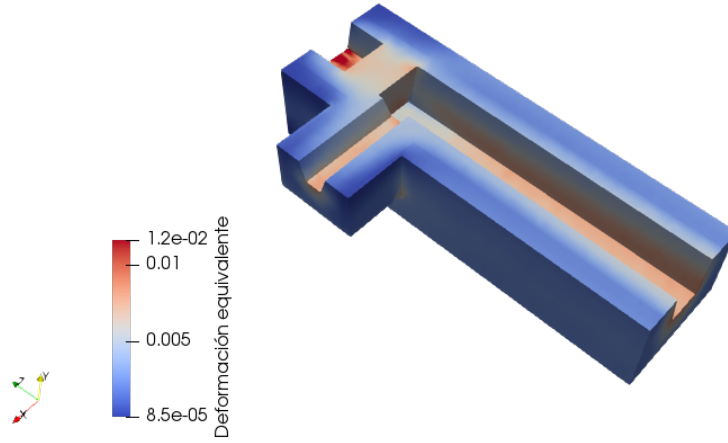


Figura 7.15: Deformación equivalente corregida, $\bar{\epsilon}_{corr}$, a lo largo del canal principal.

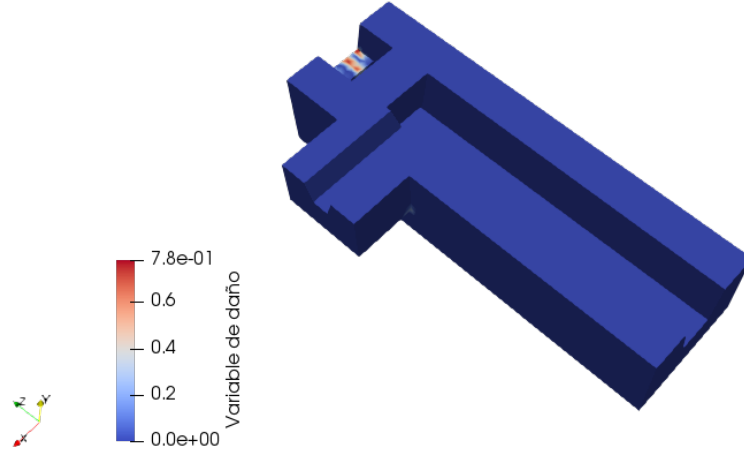


Figura 7.16: Variable de daño, D , a lo largo del canal principal.

En la Figura 7.15 vemos cómo los valores máximos alcanzados por $\bar{\epsilon}_{corr}$ a lo largo de la estructura son dos órdenes de magnitud superiores a los obtenidos en el caso sin deformación térmica (ver Figura 7.12). Esto indica que, con el modelo de daño utilizado, la deformación térmica pondera más que las cargas mecánicas en la generación de daño.

Atendiendo a la deformación equivalente de la Figura 7.15 se observa que, en las zonas donde las temperaturas son mayores, $\bar{\epsilon}_{corr}$ toma valores más grandes. Esto es cualitativamente razonable, puesto que las deformaciones térmicas son mayores que las elásticas y deben ser relevantes en la deformación equivalente.

Por otro lado, se observan efectos esquina en las deformaciones en la intersección entre las fronteras Γ_3 y Γ_6 . Estos fenómenos se trasladan al cálculo de la variable de daño (véase Figura 7.16). Sin embargo, se ha comprobado que no se producen en el caso mecánico, y sí en el termoelástico sin daño, por lo que creemos que se podría deber a cómo se introducen las cargas térmicas en el modelo, lo cual debería

hacerse también gradualmente. Se ha probado a refinar la malla, pero los efectos esquina permanecen.

Los valores obtenidos para la variable de daño no son cuantitativamente relevantes, dado nuestro desconocimiento de los parámetros del modelo. Pero sí podemos extraer algunas conclusiones cuantitativas, por ejemplo, el hecho de que la primera zona donde se produce daño es justo detrás del *skimmer*, como podemos ver en la Figura 7.16. En esa parte el arrabio se acumula y alcanza la temperatura más elevada de todo el canal, próxima a los 1500 °C, como puede verse en la Figura 7.14. Por tanto, atendiendo al predominio de la deformación térmica como causante del daño, es lógico que la zona más dañada sea justamente esa.

Capítulo 8

Conclusiones y futuras líneas de investigación

En este trabajo hemos estudiado el daño termomecánico debido a las altas temperaturas y a las cargas mecánicas soportadas por el canal principal de un horno alto. Hemos deducido los modelos de daño a partir de las ecuaciones de la Mecánica de Sólidos y las diferentes leyes de conservación, teniendo en cuenta deformaciones térmicas y elásticas. Hemos introducido un modelo de daño específico para hormigón, el modelo de Mazars, que inicialmente no tenía en cuenta las variaciones de temperatura en el cálculo del daño. Siguiendo un procedimiento sencillo, generalizamos este modelo de daño, de forma que también considere las deformaciones térmicas. Llevamos a cabo una serie de test para verificar el correcto funcionamiento de la resolución numérica, obteniendo resultados satisfactorios. A continuación, partiendo de un campo de temperaturas conocido, simulamos el daño sobre el canal principal.

En síntesis, hemos conseguido modelizar y simular numéricamente un problema de termoelasticidad con daño. El análisis de este tipo de problemas no abunda en la literatura, especialmente a temperaturas tan elevadas. El estudio ha de tomarse como una primera aproximación, puesto que la introducción de las variaciones de temperatura en el modelo de Mazars, aunque fundamentada en la bibliografía (ver [24]), no es un procedimiento muy habitual. Otra posibilidad que hemos encontrado en la bibliografía (ver [23]) es considerar de forma separada el daño elástico y el daño térmico. Pero, para utilizar una variable de daño térmica gobernada por la temperatura, se hace necesaria la resolución evolutiva del problema termohidrodinámico, que hasta este momento no ha sido posible realizar. Los avances en este sentido serán de ayuda en próximos trabajos sobre el daño en el canal.

Entre las futuras líneas de investigación proponemos realizar un análisis en profundidad de cómo afectan las deformaciones por dilatación térmica al daño mecánico.

Atendiendo a la no linealidad del problema, a su compleja resolución numérica y de cara a explotar toda la capacidad del modelo de Mazars para describir el daño en el canal, en futuras simulaciones se propone implementar un método de cálculo no local. Es conocido que el uso de la deformación equivalente corregida local para

el cálculo del daño muestra una fuerte dependencia de la malla. Para evitarlo, se han desarrollado modelos no locales (véase [29]). Una posible mejora sería aplicar dicho método a la simulación numérica del canal.

Más allá de la discusión sobre el modelo de daño a emplear, para poder obtener resultados cuantitativamente realistas, se debe disponer de una relación de parámetros experimentales específicos para los materiales que conforman el canal. Nos consta que la empresa está trabajando en la obtención de los parámetros termoelásticos de los diferentes tipos de hormigón presentes en el canal. En caso de mostrar interés por continuar estudiando el daño, se haría necesaria también la obtención de valores experimentales para el modelo de daño.

Bibliografía

- [1] S. Vázquez Fernández. Modelización matemática y simulación numérica de la transferencia de calor de una ruta de horno alto. 2015. Trabajo Fin de Máster, Máster en Matemática Industrial.
- [2] M. Seoane Chouciño. Modelización de fenómenos térmicos que afectan al canal principal del horno alto. 2016. Trabajo Fin de Máster, Máster en Matemática Industrial.
- [3] B. Nicolás Ávila. Simulación numérica de fenómenos de desgaste que afectan al canal principal del horno alto. 2017. Trabajo Fin de Máster, Máster en Matemática Industrial.
- [4] P. Barral, B. Nicolás, L. J. Pérez-Pérez, and P. Quintela. *Numerical Simulation of Wear-Related Problems in a Blast Furnace Runner. Recent Advances in Differential Equations and Applications*. SEMA SIMAI Springer Series 18, 2019.
- [5] Información sobre la empresa ArcelorMittal en España.
<https://spain.arcelormittal.com/who-we-are/our-operations.aspx>, última consulta el 29 de marzo de 2019.
- [6] Proceso siderúrgico. Construcciones relevantes de ArcelorMittal.
<https://www.youtube.com/watch?v=NpfNUs6zLHI>, última consulta el 27 de marzo de 2019.
- [7] Presentación de ArcelorMittal en el Taller de Problemas Industriales.
<http://max1.usc.es/owncloud/index.php/s/mFhN3a3uLk41xfv/download?path=%2F&files=18deSeptiembre-ArcelorMittal.pdf>, última consulta el 21 de febrero de 2019.
- [8] El proceso siderúrgico integral.
<https://spain.arcelormittal.com/who-we-are/management.aspx>, última consulta el 29 de marzo de 2019.
- [9] M. Geerdes, R. Chaigneau, I. Kurunov, O. Lingardi and J. Ricketts. *Modern Blast Furnace Ironmaking: An Introduction*. IOS Press, 2015.
- [10] C. Schacht. *Refractories Handbook*. Mechanical engineering. CRC Press, 2004.

-
- [11] J. Mazars. A description of microscale and macroscale damage of concrete structures. *Engineering Fracture Mechanics*, 25(5):729 – 737, 1986.
 - [12] J. Lemaitre and J.-L. Chaboche. *Mechanics of Solid Materials*. Cambridge University Press, 1990.
 - [13] H. Lippmann and J. Lemaitre. *A Course on Damage Mechanics*. Springer Berlin Heidelberg, 1996.
 - [14] G. D. Nguyen. *A thermodynamic approach to constitutive modelling of concrete using damage mechanics and plasticity theory*. PhD thesis, Oxford University, UK, 2005.
 - [15] J. Maßmann. *Modeling of excavation induced coupled hydraulic-mechanical processes in claystone. Report / Inst. für Strömungsmechanik und Elektronisches Rechnen im Bauwesen Bauwesen der Leibniz Universität Hannover; 77. 624.15130155361 [DDC22ger]*. PhD thesis, Leibniz Universität, Hannover, 2009.
 - [16] E. Serra and M. Bonaldi. A finite element formulation for thermoelastic damping analysis. *International Journal for Numerical Methods in Engineering*, 78(6):671–691, 2009.
 - [17] M. Bottoni. Law of damage of a fragile elastic material.
https://www.code-aster.org/V2/doc/v13/en/man_r/r5/r5.03.18.pdf,
última consulta el 21 de abril de 2019.
 - [18] F. Hamon. Law of behavior ENDO_ISOT_BETON.
https://www.code-aster.org/doc/default/en/man_r/r7/r7.01.04.pdf,
última consulta el 21 de abril de 2019.
 - [19] J. Mazars. *Application de la mécanique de l'endommagement au comportement non linéaire et à la rupture du béton de structure*. PhD thesis, Laboratoire de mécanique et technologie, Université Paris 6, 1984.
 - [20] D. Gawin, F. Pesavento, and B. Schrefler. Modelling of hygro-thermal behaviour and damage of concrete at temperature above critical point of water. *International Journal for Numerical and Analytical Methods in Geomechanics*, 26:537 – 562, 05 2002.
 - [21] D. Gawin, F. Pesavento, and B. Schrefler. Modelling damage processes of concrete at high temperature with thermodynamics of multi-phase porous media. *Journal of theoretical and applied mechanics*, 44(3):505–532, 2006.
 - [22] F. Hamon. Model of damage of Mazars.
https://www.code-aster.org/V2/doc/v13/en/man_r/r7/r7.01.08.pdf,
última consulta el 28 de febrero de 2019.
 - [23] F. Damhof, W.A.M. Brekelmans, and M.G.D. Geers. Non-local modeling of thermal shock damage in refractory materials. *Engineering Fracture Mechanics*, 75(16):4706 – 4720, 2008.

-
- [24] D. Gawin, F. Pesavento, and B. Schrefler. Modelling of hygro-thermal behaviour of concrete at high temperature with thermo-chemical and mechanical material degradation. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, 192(13):1731 – 1771, 2003.
- [25] Code_Aster: Analysis of Structures and Thermomechanics for Studies & Research. https://www.code-aster.org/UPLOAD/DOC/Presentation/plaquette_aster_en.pdf, última consulta el 23 de abril de 2019.
- [26] MFront usage in Code Aster. <http://tfel.sourceforge.net/aster.html>, última consulta el 9 de mayo de 2019.
- [27] A. F. Bower. Applied mechanics of solids. http://solidmechanics.org/text/Chapter5_1/Chapter5_1.htm, última consulta el 6 de julio de 2019.
- [28] Overview of materials for AISI 4000 Series Steel. <http://www.matweb.com/search/DataSheet.aspx?MatGUID=210fcd12132049d0a3e0cabe7d091eef>, última consulta el 7 de julio de 2019.
- [29] R. H. J. Peerlings, R. Borst, and W. A. M. Brekelmans. Computational modelling of gradient-enhanced damage for fracture and fatigue problems. *Proceedings of Computational Plasticity IV*, 1995.