

SIMULACIÓN DE FORMACIÓN DE ESTRUCTURAS DE GRANO PERIMETRAL, COLUMNAR Y EQUIAXIAL EN SECCIONES DE ACERO INCLUYENDO RUTINAS DE PRE-SOLIDIFICACIÓN

SIMULATION OF GRAIN FORMATION PERIMETRIC COLUMNAR AND EQUIAXED ON STEEL BILLETS INCLUDING PRE-SOLIDIFICATION ROUTINES

**Adán Ramírez-López^{1,2}, Omar Dávila-Maldonado¹, Héctor Herrera-Hernández^{1,2},
Pedro Vite-Martínez¹ y Felipe Hernández-Santiago¹**

(1) Instituto Politécnico Nacional (SEPI-ESIQIE), Unidad Zacatenco, Laboratorio de Análisis Metalúrgicos, Edif. Z and Edif. 6, C.P. 07300 México, D.F. - México

(2) Universidad Autónoma Metropolitana-Azcapotzalco, Departamento de Materiales, Coordinación de Posgrado en Ciencias e Ingeniería, Av. San Pablo #180 col. Reynosa, Del. Azcapotzalco, C.P. 02200 México, D.F. – México
(e-mail: adaramil@yahoo.com.mx)

Recibido: 04/08/2010 - Evaluado: 12/08/2010 - Aceptado: 16/08/2010

RESUMEN

Este trabajo muestra el desarrollo y la implementación de algoritmos computacionales basados en teoría del caos y autómatas celulares para la simulación del crecimiento de granos en secciones cuadradas de acero producidas por colada continua. Se desarrollaron tres algoritmos para la simulación de las estructuras de grano en las zonas perimetral, columnar y equiaxial; incluyen rutinas para estimular la nucleación y crecimiento del grano. Estas fueron compiladas separadamente al algoritmo principal con el objeto de hacer más eficiente el sistema de simulación. Los algoritmos analizan todos los nodos a cada paso, durante la simulación de cálculo y una interfase de despliegue gráfico muestra en la pantalla el proceso de solidificación. La teoría del caos fue empleada integrando un proceso aleatorio de selección. El resultado de este análisis es una imagen digital de celdas que representan a los granos (autómata celular) y es desplegada en la pantalla en función a un código numérico asignado a las posiciones nodales.

ABSTRACT

This work shows the development and application of computational algorithms based on chaos theory and cellular automaton to simulate the grain growth process on squared steel billets produced by continuous casting. Three algorithms were developed to simulate the grain structures on chill, columnar and equiaxed zones. These include routines to simulate grain nucleation and growth. These routines were compiled separately from the main routine in order to make more efficient the simulator. Algorithms analyze each node at every step time during simulation and a graphical interface is used to display the results on the screen. Chaos theory is used for integrating a random selection process. The result is an image formed with cells that represent grains (cellular automaton) displayed on the screen based on a numeric code assigned to the nodal positions.

Palabras clave: colada continua, simulación computacional, estructuras de granos, autómatas celulares

Keywords: continuous casting, computational simulation, grains structures, cellular automata

INTRODUCCIÓN

El proceso de colada continua es el proceso más empleado en la fabricación de productos de acero por lo cual es necesaria su comprensión y modelación matemática para mejorar el rendimiento de las instalaciones y la calidad de los productos. Diversos autores (Brimacombe et al., 1980; Choudhary et al., 1993; Choudhary y Mazumdar, 1994; Louhenkilpi et al., 1993; Louhenkilpi, 1995; Ramírez et al., 2006a; Ramírez et al., 2006b; Ruhul Amin y Anurag, 2006) han simulado fenómenos físicos involucrados en este proceso, como son el comportamiento térmico que incluye los mecanismos de extracción de calor resolviendo las ecuaciones correspondientes a la convección forzada, la radiación y la conducción. Otros han desarrollado diferentes modelos para simular la formación de las estructuras de granos (Randle et al., 2008; Shin y Hong, 2002; Zhang et al., 2003; Liu et al., 2006; Yoshioka et al., 2004; Ivasishin et al., 2003; Raabe, 1998; Crank y Nicholson, 1947; Fachinotti y Cardona, 2003; Zhu et al., 2001). Otros autores (Liu et al., 2006; Ivasishin et al., 2003; Fachinotti y Cardona, 2003; Zhang et al., 2003; Zhu et al., 2001; Shin y Hong, 2002; Yoshioka et al., 2004) han empleado diferentes métodos matemáticos como son diferencias finitas y elemento finito para la representación de las secciones de acero y han expuesto sus ventajas de cálculo.

La ecuación diferencial parcial (1) indica que existe una solución parcial (un gradiente de temperaturas parcial) para la sección de acero discretizada a cada paso de la simulación. Debido a que la extracción de calor en la dirección de colada fue considerada como no significativa; y a que solamente se utiliza un único volumen de acero para el cálculo térmico, el modelo a emplear es bidimensional y se puede expresar en función a los ejes (x) e (y) que representan a la sección de acero discretizada. En este, cada nodo del arreglo bidimensional representa la cantidad de energía necesaria para calentar un volumen discretizado de acero de dimensiones ($\Delta x, \Delta y, \Delta z$).

$$\frac{\partial}{\partial x} \left(k \frac{\partial T}{\partial x} \right) + \frac{\partial}{\partial y} \left(k \frac{\partial T}{\partial y} \right) + q = \rho c_p \frac{\partial T}{\partial t} \quad (1)$$

Donde (q) es el flujo de calor que se extrae o se conduce según la posición del nodo en el arreglo. Mientras que los valores de (ρ) y (c_p) corresponden a las propiedades físicas del acero. En una investigación anterior Ramírez et al. (2006a; 2006b) desarrollaron un algoritmo de simulación que involucraba a estos mecanismos de extracción de calor. Este algoritmo incluía el intercambio de información entre dos modelos computacionales; el primero que representaba la cinemática y describía el proceso de colada continua tal y como ocurre en la realidad para representarlo computacionalmente; cuya información era empleada para designar las condiciones de extracción de calor en función a la posición del volumen de acero discreteado en la máquina de colada por el segundo modelo creado para realizar el cálculo de comportamiento térmico.

Se calcularon los perfiles de temperatura para secciones de acero cuadradas utilizando un mallado estructurado de celdas reticulares y un método de resolución de diferencias finitas. En este algoritmo los valores de energía ($H_{i,j}$) y de temperaturas ($T_{i,j}$) eran calculados y actualizados a cada intervalo de tiempo de la simulación ($t + \Delta t$). Aquí los subíndices (i) y (j) se utilizaban para indicar la posición de cada nodo en el arreglo. Para este modelo se desarrollaron herramientas de despliegue que permitían mostrar las curvas de temperatura superficial y los perfiles en el interior de la sección; así como opciones con menús interactivos para la lectura de datos de trabajo como la geometría de la máquina de colada y sus condiciones de operación.

La ecuación (1) puede también ser re-escrita para evidenciar que la solución parcial depende de las propiedades del acero a cada instante de la simulación como lo muestra la ecuación (2).

$$k \left(\frac{\partial^2 T}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 T}{\partial y^2} \right) = \rho c_p \frac{\partial T}{\partial t} \quad (2)$$

Por lo que inicialmente se calculó la energía necesaria para calentar a un volumen de acero hasta la temperatura de colada con el empleo de la ecuación (3). Tomando en consideración todos los cambios de fase que aparecen como los límites de cada una de las integrales.

$$H = q = \int_{T=To}^{T=T_{AR1}} Wc_p dT + \int_{T=T_{AR1}}^{T=T_{AR3}} Wc_p dT + \int_{T=T_{AR3}}^{T=T_{sol}} Wc_p dT + \int_{T=T_{sol}}^{T=T_{liq}} Wc_p dT + \int_{T=T_{liq}}^{T=T_{co}} Wc_p dT \quad (3)$$

Se consideraron únicamente los nodos que forman las superficies laterales de la sección de acero como aquellos en los cuales se aplicaron las condiciones de extracción de calor. Mientras que en el interior de la sección se considero que el flujo de calor era redistribuido por conducción.

La misma cantidad de energía fue asignada a cada nodo ya que se considera que el volumen de acero tiene la misma temperatura al inicio de la simulación.

Por lo que partiendo de la ecuación (2) se pueden desarrollar las derivadas parciales en función de las dimensiones de la superficie que corresponden a los análisis parciales de las temperaturas sobre cada eje de la sección. Como se puede apreciar estos análisis realizados de manera diferencial involucran a los nodos vecinos más próximos al nodo en análisis de posición ($I \pm 1, J \pm 1$) que representan a los intervalos ($x_1 + \Delta x$) y ($y_1 + \Delta y$) respectivamente; obteniendo las ecuaciones (4) y (5).

$$\frac{\partial^2 T}{\partial x^2} = \frac{1}{(\Delta x)^2} (T_{I-1,J} + T_{I+1,J} - 2T_{I,J}) \quad (4)$$

$$\frac{\partial^2 T}{\partial y^2} = \frac{1}{(\Delta y)^2} (T_{I,J-1} + T_{I,J+1} - 2T_{I,J}) \quad (5)$$

De la ecuación (2) además, la derivada temporal de la parte derecha puede ser representada por la ecuación (6).

$$\frac{\partial T}{\partial t} = \frac{T_{I,J}^{t+1} - T_{I,J}^t}{\Delta t} \quad (6)$$

Por lo que sustituyendo las ecuaciones (4), (5) y (6) en la ecuación (2) se tiene como resultado una formula de regla de Crank-Nicolson (Crank y Nicholson, 1947) que es un método típico para resolver sistemas de ecuaciones diferenciales por diferencias finitas. Esta ecuación es fácilmente anidable para la realización de cálculos térmicos en ciclos computacionales de trabajo.

$$\frac{1}{(\Delta x)^2} (T_{I-1,J} + T_{I+1,J} - 2T_{I,J}) + \frac{1}{(\Delta y)^2} (T_{I,J-1} + T_{I,J+1} - 2T_{I,J}) = \frac{1}{\alpha_{I,J}} \frac{T_{I,J}^{t+1} - T_{I,J}^t}{\Delta t} \quad (7)$$

Además se calcula un intervalo de tiempo para la estabilidad del cálculo numérico, mediante la ecuación (8) que involucra las dimensiones de los elementos utilizados y las propiedades del acero. Esto se hace para tener una certidumbre y congruencia entre los cálculos matemáticos, el material a analizar y el número de nodos empleados para su discretización. Los valores de (Δx) y (Δy) son calculados resolviendo las ecuaciones (9) y (10). Finalmente el valor de difusividad térmica (α) es calculado utilizando la ecuación (11).

$$\Delta t = \frac{\Delta x \Delta y}{4\alpha} \quad (8)$$

$$\Delta x = \frac{l_x}{n_x} \quad (9)$$

$$\Delta y = \frac{l_y}{n_y} \quad (10)$$

$$\alpha = \frac{k}{\rho c_p} \quad (11)$$

Para el caso de la transferencia de calor dentro del molde, cuyo estudio es muy complejo, muchos autores han establecido un gran número de ecuaciones para representar el flujo de calor que se extrae mientras el acero permanece dentro de este, el presente modelo emplea la ecuación (12) que fue desarrollada en función al tiempo (t_{res}) y los valores (A_0) y (B_0) calculados por Savage y Pritchard (1954).

$$q = A_0 + B_0 \sqrt{t_{res}} \quad (12)$$

El valor del flujo de calor que extraen los rociadores en el sistema de enfriamiento secundario se calculo mediante el empleo de la ecuación de transferencia por convección forzada (13).

$$q = h (T_{i,j} - T_w) \quad (13)$$

Donde (T_w) es la temperatura del agua utilizada. (h) es un coeficiente de extracción de calor que es determinado en función a la intensidad del chorro de agua aplicado.

Para la solución a la extracción de calor en las zonas intersticiales del sistema de enfriamiento secundario (espacio libre entre rociadores) se utilizó la ecuación general de radiación de Stefan-Boltzmann al igual que en la zona libre al final de la operación de colada.

$$q = \sigma \epsilon (T_{i,j}^4 - T_{amb}^4) \quad (14)$$

En ciencia de materiales y en metalurgia diversos autores (Randle et al., 2008; Shin y Hong, 2002; Zhang et al., 2003; Liu et al., 2003; Yoshioka et al., 2004; Ivasishin et al., 2003; Raabe, 1998; Crank y Nicholson, 1947; Fachinotti y Cardona, 2003; Zhu et al., 2001; Savage y Pritchard, 1954; Flemings, 1974) han desarrollado modelos computacionales para reproducir propiedades y estructuras de materiales que debido a su complejidad no pueden ser tratados con métodos determinísticos convencionales como lo son las estructuras de grano.

Algunos autores (Shin y Hong, 2002; Yoshioka et al., 2004; Raabe, 1998; Zhu et al., 2001) han desarrollado modelos para reproducir el crecimiento dendrítico que es la base de los fenómenos de solidificación.

Otros autores (Zhang et al., 2003; Liu et al., 2006; Fachinotti y Cardona, 2003; Zhu et al., 2001; Yoshioka et al., 2004; Shin y Hong, 2002) han desarrollado modelos de crecimiento de grano utilizando diferentes tipos de modelos y estableciendo comparaciones entre ellos. Algunos más (Zhang et al., 2003; Liu et al., 2006; Yoshioka et al., 2004) han descrito algunas características importantes de los metales como lo son las interfases entre los granos y su formación utilizando diferentes variables para la formación de la estructura final. Inclusive otros autores (Ivasishin et al., 2003; Zhang et al., 2003) han estudiado los cambios en la morfología de la estructura como la re-cristalización y el cambio de fases debido a procesos de tratamientos térmicos, mecánicos y de pos-manufactura.

Sin embargo hay una gran cantidad de detalles aun por explicar y comprender para la comprensión de los fenómenos y las variables involucradas en la solidificación, como lo son: la formación de interfases debida a condiciones específicas de manufactura y la comprensión de los mecanismos físicos que provocan la formación y modificación de los granos.

En el presente trabajo la información del cálculo térmico acerca de los tiempos de solidificación obtenida mediante métodos computacionales determinísticos es utilizada por algoritmos para generar una imagen digital desplegada por celdas en píxeles (originalmente nodos) que representan a los granos.

LECTURA Y MANEJO DE DATOS

Debido a que se requiere una cierta cantidad de energía ($H_{I,J}$) para calentar los volúmenes de acero discretizados hasta la temperatura de colada (T_c); y que la cantidad de flujo de calor que se extrae a la sección esta definida en estos mismos términos, la analogía entre los dos primeros términos de la ecuación (15) es valida e indica que para cada valor de energía corresponde un valor de temperatura en función a cada instante del tiempo durante la simulación.

En consecuencia si se conoce el intervalo de tiempo (Δt) y la velocidad de colada (v_{co}) del proceso es posible incluir una rutina de salvado de datos para los tiempos en los cuales cada nodo paso del estado líquido al pastoso ($t_{liq\ I,J}$) y del pastoso al sólido ($t_{sol\ I,J}$) dentro del ciclo de cálculo principal (Ramírez et al., 2006a; Ramírez et al., 2006b). Estos tiempos pueden ser salvados y ordenados utilizando un par de arreglos computacionales bidimensionales para ser empleados posteriormente en el proceso de simulación de crecimiento de grano. Esto hace posible que la relación del tercer término de la ecuación (15) sea equivalente a sus dos predecesoras. Por lo que esta información puede ser utilizada por otros algoritmos computacionales para reconstruir el proceso de extracción de calor y simular el crecimiento de granos.

$$\frac{T_{I,J}^t}{T_{sol} - T_{liq}} = \frac{H_{I,J}^t}{H_{sol} - H_{liq}} = \frac{t_{I,J}}{t_{sol} - t_{liq}} \quad (15)$$

Los tiempos de residencia de cada nodo en el estado pastoso ($t_{pas\ I,J}$) no requieren ser salvados desde el modelo de comportamiento térmico. Estos se obtienen mediante la ejecución de un par de ciclos anidados con limites desde ($I=1$) hasta ($I=nI$) y desde ($J=1$) hasta ($J=nJ$). Estos son utilizados para la resolución de la ecuación (16) y los resultados son almacenados en un nuevo arreglo computacional bidimensional. El tiempo de residencia en estado pastoso es un valor muy importante a ser calculado ya que es un parámetro de la velocidad de solidificación (Yoshioka et al., 2004). Mientras mayor sea el tiempo de permanencia en estado pastoso la velocidad de solidificación será menor.

$$t_{pas\ I,J} = (t_{sol\ I,J} - t_{liq\ I,J}) \quad (16)$$

La información general de la sección colada como el número de nodos empleados (nI) y (nJ), las dimensiones (lx), (ly) y temperaturas de cambio de estado, así como la geometría de la sección son salvadas también ya que son necesarias para la interpretación de los datos nodales y la representación geométrica de la sección.

Debido a que el sistema en estudio es función del tiempo se puede incluir una rutina en el ciclo principal de simulación para calcular las fracciones de sólido ($X_{sol\ I,J}$) y líquido ($X_{liq\ I,J}$) pertenecientes a cada nodo para cada intervalo de tiempo mediante el empleo de las ecuaciones (17) y (18). Estas fracciones son de gran importancia y son empleadas en las rutinas de pre-solidificación en las zonas columnar y equiaxial. Aquí el super-índice (t) indica que estos cálculos se realizan a cada paso de la simulación.

$$X_{liq,I,J}^t = \frac{t_{I,J}}{t_{sol} - t_{liq}} \quad (17)$$

$$X_{sol,I,J}^t = X_{liq,I,J}^t - 1 \quad (18)$$

CONSIDERACIONES DE SIMULACIÓN

Las consideraciones iniciales de la simulación son las siguientes:

Los datos de trabajo son leídos de archivos y fueron calculados con el modelo desarrollado por Ramírez et al. (2006a; 2006b). Estos se encuentran ordenados en filas y columnas con un tipo de dato de punto flotante y forman una malla rectangular de elementos estructurados.

Los algoritmos desarrollados en el presente trabajo son procesos dinámicos que incluyen y excluyen de las rutinas de solidificación y pre-solidificación a aplicar en los nodos en función a su evolución durante la simulación.

Se asume que todos los nodos representan volúmenes discretizados de acero iguales y de una composición igual y homogénea.

Se asume que todos los nodos de la sección discretizada están en estado líquido al inicio de la simulación ($t=0$).

Cada iteración corresponde a un paso de la simulación y cada paso es igual al tiempo de la iteración anterior (acumulado) más el incremento de tiempo ($t=t^{t-1} + \Delta t$)

La simulación finaliza cuando el tiempo de la simulación y valor del tiempo del nodo que más tarda en solidificar son iguales ($t=t_{\max \text{ sol } I,J}$).

El intervalo de tiempo utilizado (Δt) que se emplea para realizar la simulación es el mismo que fue calculado para el cálculo del comportamiento térmico.

El intervalo de tiempo (Δt) determina el número de iteraciones o pasos (np) de la simulación mediante la ecuación (19).

$$np = \frac{t_{\max}}{\Delta t} \quad (19)$$

Al inicio de la simulación se asume que no hay ningún nodo solidificado ya que todos están en estado líquido, por lo que tampoco existe ningún grano. En consecuencia todos los valores de las celdas del autómata celular son también inicializados como ($C_{I,J}=0$) que representa vacío.

Inicialmente para el proceso de simulación de crecimiento de grano, se genera una malla más fina para tener una mejor aproximación durante los procesos de nucleación y crecimiento de los granos mediante el empleo de las ecuaciones (20) a (22). Un mallado con mayor número de nodos proporciona una mayor cantidad de celdas para representación; ya que el número de valores se incrementa de manera cuadrática en un modelo bidimensional.

Estas ecuaciones son anidadas en un par de ciclos de cálculo. Aquí los subíndices (i) y (j) se utilizan para identificar los nuevos valores calculados para los nodos dentro de la celda inicial cuyos valores se utilizan como condiciones de frontera. El procedimiento se ilustra en el diagrama de flujo de la figura (1a). Es necesario

incluirlo; ya que durante el cálculo térmico se emplearon arreglos computacionales de 10,000 nodos (100x100). Estos arreglos proporcionaban una aproximación muy buena del comportamiento térmico debido a la sencillez de la geometría a calcular (sección cuadrada); sin embargo para reproducir las características geométricas de los granos como la heterogeneidad y la anisotropía se requiere de una mayor resolución para una mejor aproximación.

$$t_{i1} = t_{I,J} - i \frac{(t_{I,J} - t_{I-1,J})}{f} \tag{20}$$

$$t_{i2} = t_{I-1,J} - i \frac{(t_{I,J-1} - t_{I-1,J-1})}{f} \tag{21}$$

$$t_{i,j} = t_{i1} - j \frac{(t_{i1} - t_{i2})}{f} \tag{22}$$

En la ecuaciones (20) a (22); (f) es el factor de ampliación y es el límite superior de los ciclos en el área sombreada de la figura (1a) que calculan los nuevos valores de los nodos internos de la celda en análisis que se ilustra en la figura (1b). Mediante este procedimiento una malla de (100x100) nodos puede ser convertida en una de (500x500) si se utiliza un valor de (f=5).

A cada paso de la simulación, cada nodo del arreglo es analizado independientemente donde es llamado nodo pivote. El análisis se hace con un par de ciclos anidados que van desde (I=2) hasta (I=nI) y desde (J=2) hasta (J=nJ). Los cuatro nodos que componen la celda en análisis son (I,J), (I-1,J), (I,J-1) y (I-1,J-1) como se aprecia en la figura (1b).

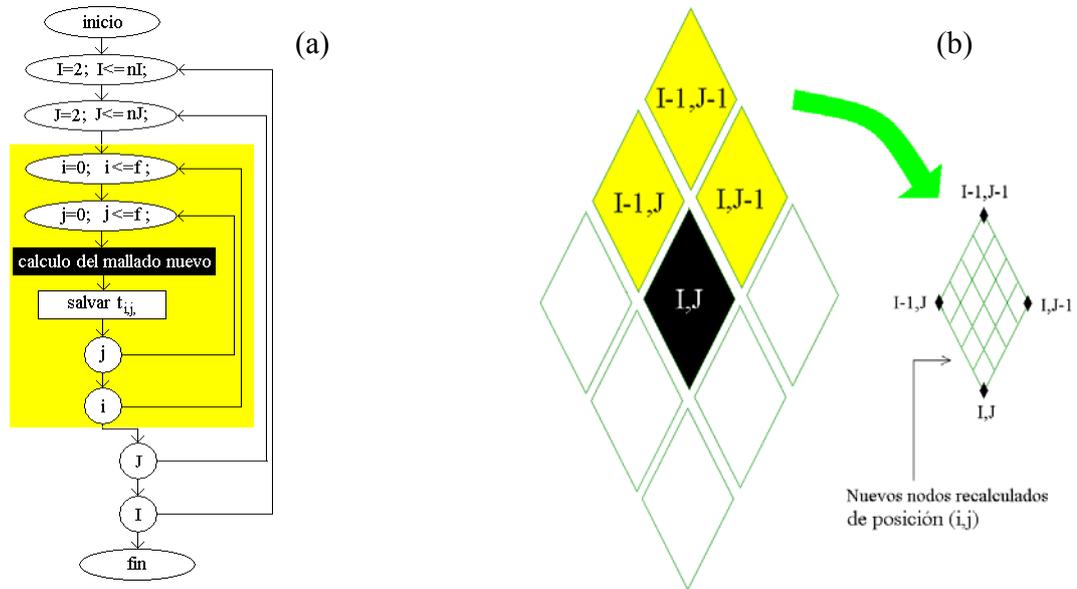


Fig. 1: a) Diagrama de flujo para cálculo de un mallado más fino. b) Nodos de la celda en análisis para generar un mallado mas fino.

Se diseñaron rutinas de representación grafica que reconstruyen el cálculo térmico utilizando únicamente los datos de los tiempos de solidificación. Estas rutinas calculan por comparación los tiempos máximos de solidificación y generan una escala en píxeles para la pantalla de la computadora y ubican los tiempos en la posición correspondiente proporcionando una reconstrucción gráfica de los cambios de estado (liquido-pastoso y

pastoso-sólido). Además se integró una rutina de selección al algoritmo de despliegue para poder realizar cortes en la sección. Un ejemplo de este tipo de despliegue se aprecia en la figura (2) que muestra un corte ($\frac{3}{4}$) de la sección para poder apreciar la permanencia del acero en estado líquido y pastoso al interior de la sección.

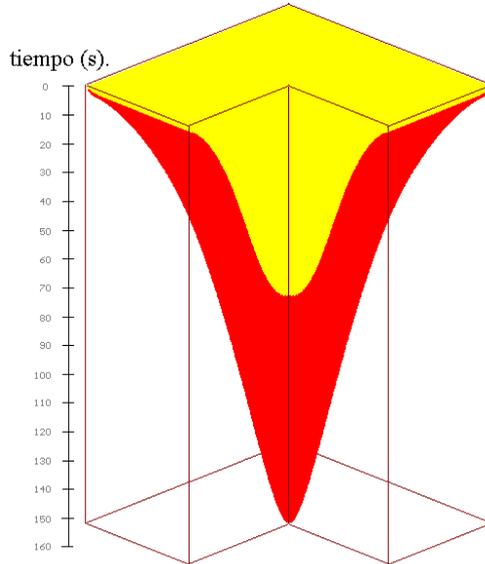


Fig. 2: Reconstrucción tridimensional del cálculo térmico utilizando los datos de trabajo.

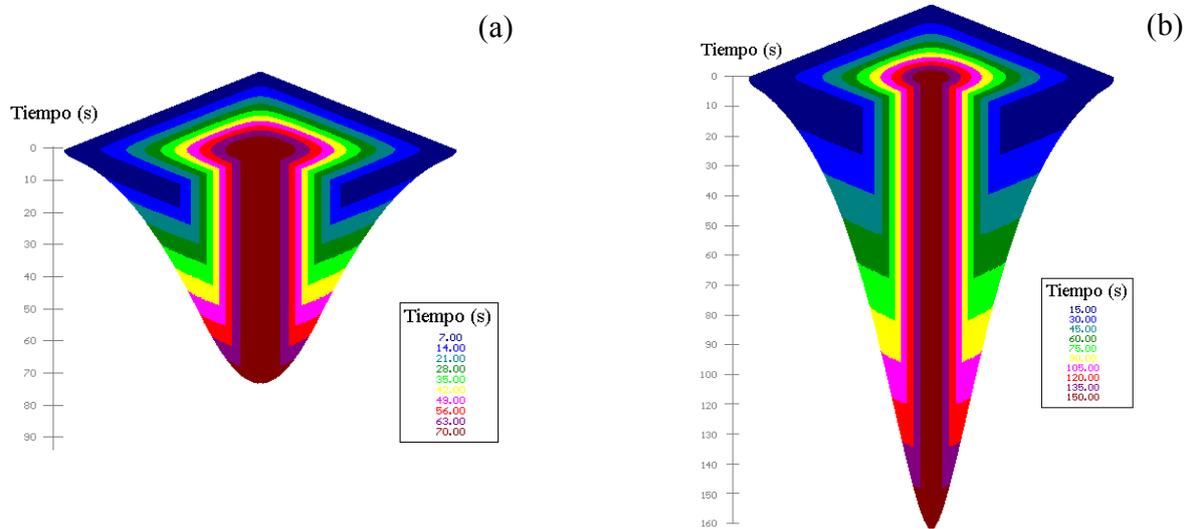


Fig. 3: Clasificación de los tiempos de solidificación

Estos ciclos y el proceso básico, pueden ser reutilizados para clasificar los tiempos de solidificación de cada nodo en función a la escala de tiempo como se ilustra en las figuras (3a) y (3b). Los datos empleados para estas reconstrucciones así como la de la figura (2) corresponden a una sección cuadrada de (160x160mm) que fue colada en una máquina de colada de 7.5m de radio de curvatura. El acero líquido fue recibido en un molde de cobre de 1m. de longitud a un nivel 80% de menisco utilizando las condiciones de enfriamiento mostradas en la AVANCES EN CIENCIAS E INGENIERÍA (ISSN: 0718-8706)

tabla (1) para el sistema de enfriamiento secundario (zona de rociadores). En esta, los valores de (θ) y de (Ω) corresponden a los ángulos que forman cada una de las zonas de enfriamiento y a los ángulos de disparo de las rociadores respectivamente. Los subíndices (ze) hacen referencia precisamente a las zonas de enfriamiento correspondientes y El valor (D_b) es la distancia de la boquilla del rociador hasta la superficie de la sección. Esta sección fue colada a una velocidad de 2.35 m/min.

En las figuras (3a) y (3b) se aprecia una clasificación de tiempos para los cambios de estado desde su estado líquido inicial hasta el pastoso y hasta su solidificación. Esta clasificación fue realizada utilizando intervalos fijos y un código de colores para su despliegue.

Tabla 1: Condiciones de enfriamiento en el sistema de enfriamiento secundario.

case	1				2		3		
Segmento	1	2	3	4	1	2	1	2	3
Flujo de agua (l/min)	187	244	205	199	175	154	105	207	139
Número de espreas	1	9	9	9	10	10	8	11	8
θ	2	12.6	16	16	20	20	7.5	22.5	30
Ω	60	60	60	60	55	55	80	60	60
D_{bs} (mm)	160	160	160	160	150	150	60	110	75

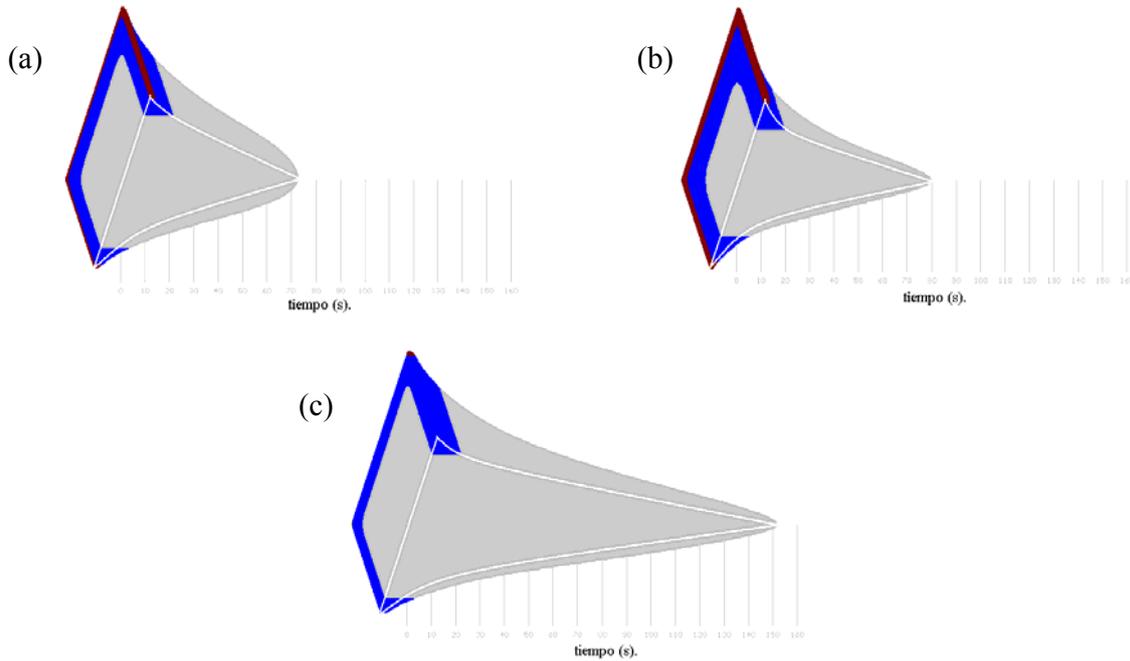


Fig. 4: Clasificación de los tiempos de trabajo a) Paso de líquido a pastoso. b) permanencia en pastoso. c) Paso de pastoso a sólido

Las figuras (4a) a (4c) muestran una clasificación de los nodos en función a los tiempos de residencia en cada estado (t_{liq} , t_{pas} y t_{sol}). En estas se emplearon valores de ($t_{equi} \leq 2s.$) y ($t_{col} \leq 15s.$) para ilustrar en momento en el cual se forman las tres zonas de granos. estos valore se usan como criterios para la clasificación y como se

puede apreciar el tiempo de residencia en estado pastoso ($t_{pas\ i,j}$) proporciona la dimensión y la forma más aproximada para representar los límites entre las 3 zonas de granos a simular.

La clasificación de cambio de estado líquido a pastoso ($t_{liq\ i,j}$) también da una morfología parecida pero las dimensiones de la zona perimetral son menores; mientras que la clasificación empleando los tiempos de solidificación finales ($t_{sol\ i,j}$) muestra solamente una pequeña área cerca de las esquinas para formar la zona perimetral lo cual no es correcto. Razones por las cuales se asume que el tiempo de permanencia en estado pastoso ($t_{pas\ i,j}$) es el más apropiado para definir las dimensiones y forma de las tres zonas de granos al ser comparados con valores numéricos. Además de que este tiempo de residencia es un indicador de la velocidad de solidificación de cada nodo.

ESTRUCTURAS DE GRANOS EN LAS 3 ZONAS

Durante la solidificación de las secciones de acero se forman 3 zonas de diferente morfología de grano en las cuales la velocidad de solidificación tiene una gran importancia como se explica a continuación:

La zona perimetral es llamada en inglés zona chill, en esta zona la velocidad de solidificación es muy alta debido a que es la primera zona de la sección de acero que pierde energía por las condiciones de enfriamiento dentro del molde. Esta delgada zona tiene la función de soportar la presión del acero líquido en el interior de la sección. Esta es formada rápidamente en la superficie de la sección y en ella se encuentran una gran cantidad de granos de pequeñas dimensiones (muy finos); debido a que la fuerte extracción de calor produce un gran número de puntos de nucleación cuyo crecimiento se ve interrumpido por otros granos que crecen simultáneamente.

Posteriormente se forma una zona de granos columnares en la cual los granos crecen en forma alargada y en dirección al centro de la sección (contraria al flujo de calor). Aquí la velocidad de solidificación disminuye ya que esta zona se encuentra en el interior de la sección y no hay una extracción de calor directa como en los nodos de la zona perimetral.

El efecto del enfriamiento es notorio en las esquinas debido a que la relación (perímetro/área) es mayor que en la mitad de las superficies. Lo cual indica que el perímetro formado por los nodos donde se extrae el calor es mayor en comparación con el área de la sección. Esto provoca que las esquinas permanezcan más frías en el proceso de enfriamiento y que solidifiquen primero. Aquí los nodos nucleados crecen perpendiculares a su superficie de origen y su crecimiento se ve interrumpido debido a los granos que crecen perpendiculares a estos. Además la longitud de estos va de menor cerca de las esquinas y hacia mayor en la parte central de la sección.

Finalmente se forma una tercera zona llamada zona equiaxial donde se forman granos aleatoriamente orientados y de dimensiones mayores como resultado del largo tiempo de permanencia en estado pastoso. Los nodos del centro de la sección permanecen largo tiempo en estado pastoso ya que el flujo de calor debe ser conducido hasta las superficies para ser removido y no se aplican condiciones de extracción directa en estos.

PROCESOS DE SOLIDIFICACIÓN Y PRE-SOLIDIFICACIÓN

El proceso de solidificación simple involucra los procesos de nucleación y crecimiento; siendo estos susceptibles de suceder en cualquiera de los nodos. Estos son los algoritmos básicos en la simulación de formación de estructuras de granos.

Tomando en consideración que la solidificación se da cuando la pérdida energética de un nodo es tal que su correspondiente valor de temperatura es inferior al de la temperatura de solidificación del material deberá verificarse como verdadera la condición ($T_{i,j}^t < T_{sol}$). Por lo tanto haciendo la analogía con los valores de los tiempos de solidificación como se demostró en la ecuación (15), se puede incluir en la rutina de cálculo principal

la condición de que cuando el tiempo de la simulación sea mayor al tiempo de solidificación del nodo pivote, este solidifica de manera natural ($t > t_{sol\ i,j}$). Cuando esta condición es verdadera el nodo pivote solidifica y puede nuclear o crecer. Pero solamente uno de estos dos procesos se aplica.

Una vez que un nodo ha sido solidificado se registra su valor en la matriz que guarda los valores del autómata celular utilizando un tipo de dato entero.

Se considera que un nodo nuclea independientemente cuando da origen a un nuevo grano; se utiliza una rutina que genera un número aleatorio cuyo código numérico es asignado y actualizado al autómata celular, por lo que cuando un nodo ha sido nucleado se verifica la condición de no vacío ($C_{i,j} \neq 0$).

Si el nodo nuclea, se genera un número aleatoriamente, el cual será tomado como valor identificación del nuevo nodo y que será igual a su correspondiente color en código numérico. Este nuevo valor numérico es guardado en un nuevo arreglo computacional bidimensional y es desplegado en la pantalla utilizando un píxel del color correspondiente.

Una vez que un nodo ha sido solidificado su estado se considera permanente es decir un nodo no puede ser solidificado más de una vez.

Cuando el nodo crece se realiza un análisis vecinal de cada nodo pivote. Como se muestra en la figura (5a) este análisis involucra a los 8 nodos vecinos más próximos y es conocido como análisis de Moore (Raabe, 1998). Este es comúnmente empleado como técnica matemática de análisis en la generación de autómatas celulares y se usa para asignar probabilidades de crecimiento preferenciales en función a la zona donde se encuentra el nodo pivote y sus condiciones de solidificación. Sin embargo el número de vecinos disponibles puede disminuir en función a su posición en el arreglo y a su estado dentro de la simulación como se explica a continuación.

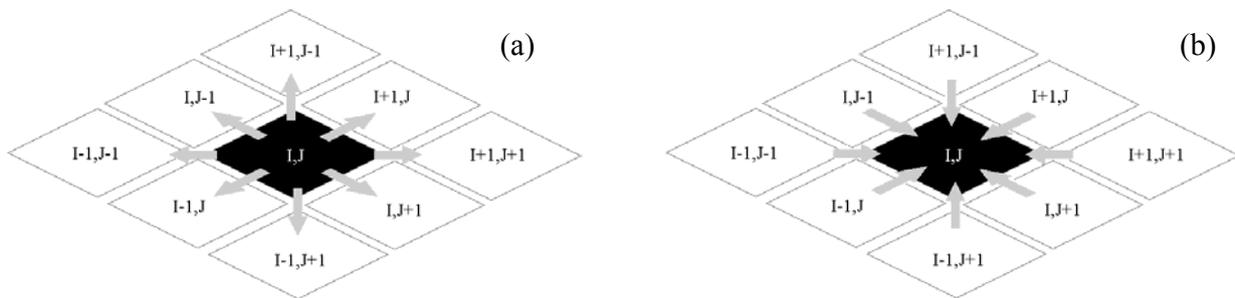


Fig. 5: Proceso para búsqueda y análisis de vecinos. a) Para solidificación b) Para pre-solidificación

Si el nodo pivote está en el perímetro ó las esquinas de la sección probablemente alguno ó algunos de los nodos vecinales se encontrarán fuera del arreglo computacional por lo que este ó estos serán ignorados si alguna de las siguientes condiciones es verificada: Si ($i < 1$), si ($i > nI$), si ($j < 1$) ó si ($j > nJ$). Estas operaciones de comparación son realizadas para verificar que los nodos vecinos existen y son congruentes con el análisis. En las primeras dos condiciones "i" es la posición del vecino en análisis con respecto al eje horizontal de referencia de la sección pudiendo adoptar los siguientes valores: ($i = I - 1$), ($i = I$) y/o ($i = I + 1$).

Del mismo modo se comprueba para el eje vertical representado por "j" y "J" respectivamente. La figura (6) muestra un corte a (1/4) de una sección colada con diferentes nodos en el mallado de discretización. El nodo (a) debido a su ubicación tiene 8 vecinos para el análisis. El nodo (b) tiene (5) vecinos para su análisis; mientras que el nodo (c) que se encuentra en la esquina tiene solamente (3) vecinos posibles.

Durante el proceso de simulación se comparan los valores de los tres arreglos que contienen los tiempos de cambio de estado ($t_{sol,i,j}$, $t_{pas,i,j}$ y $t_{liq,i,j}$) y son actualizados después de cada aplicación de las rutinas de pre-solidificación, adicionalmente para las tomas de decisiones se comparan también los valores de identificación del autómata celular generado para representar los granos ($C_{i,j}$) para verificar si los nodos han sido pre-solidificados y/o si deben ser incluidos en el cálculo.

Si alguno de los vecinos en análisis tiene asignado un valor numérico en el arreglo de la estructura de grano, este será ignorado ya que se considera que este nodo ya fue solidificado y por lo tanto no esta disponible para crecer.

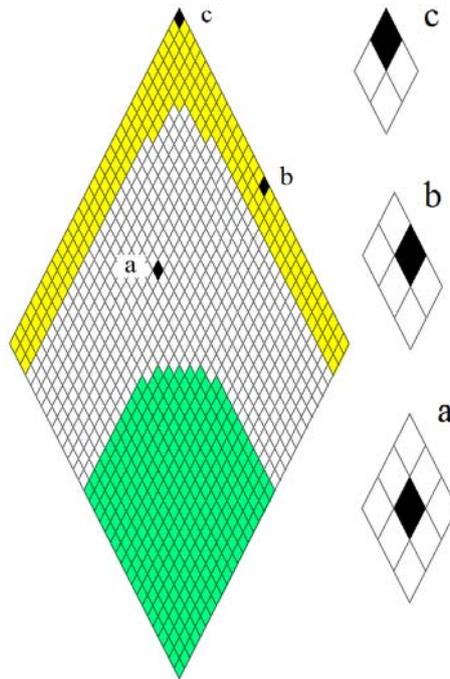


Fig. 6: Vecinos disponibles para nodos ubicados en diferentes posiciones.

Se considera que un nodo puede ser pre-solidificado cuando solidifica antes de que su tiempo de solidificación sea alcanzado de manera natural ($t_{sol,i,j} < t$). Esto representa la hipótesis de varios autores (Randle et al., 2008; Liu et al., 2006; Yoshioka et al., 2004; Ivasishin et al., 2003) que mencionan que un nodo puede ser solidificado antes de que esta condición ocurra si su fracción sólida es tal que lo pudiera propiciar.

Hay dos rutinas de pre-solidificación al igual que en los procesos de solidificación que son las rutinas de pre-nucleación y pre-crecimiento. Para su inclusión en el ciclo principal de simulación se emplean las rutinas de nucleación y crecimiento simples pero se modifican algunas de sus condiciones de búsqueda vecinal como se explica a continuación.

A cada iteración un nodo solamente pre-nuclea independientemente ó pre-crece con algún único vecino. Esto es posible una única vez a cada iteración de cálculo.

Un nodo tiene una probabilidad de pre-nuclear o pre-crecer igual a cero ($p_n=p_c=0$) mientras permanece en estado líquido; sin embargo conforme pasa al estado patoso se inicia el calculo de las fracciones de sólido y líquido (X_{sol}) y (X_{liq}). Ahora al incrementarse el tiempo de la simulación la fracción de sólido será cada vez mayor por lo que la probabilidad de que este nodo pre-solidifique también se incrementará.

Si un nodo fue pre-solidificado, la energía ($H_{i,j}$) que fue perdida se redistribuye hacia los vecinos mas próximos. Para lo cual se emplea una rutina de búsqueda. En caso no existir un nodo vecino inmediato, se incrementa el intervalo de búsqueda hasta encontrar al menos un vecino disponible para realizar la redistribución. Esta redistribución da como resultado un incremento en los tiempos de solidificación de los vecinos y por lo tanto también en su fracción sólida disminuye. En consecuencia los valores de los tiempos de solidificación ($t_{sil i,j}$) deben ser re-calculados y actualizados.

Para que un nodo sea considerado como disponible para recibir la distribución del calor latente del nodo pre-solidificado este no debe haber sido solidificado.

La redistribución de la energía se realiza tomando en consideración una conducción isotrópica y homogénea por lo que si se encuentra 4 vecinos no solidificados como vecinos, cada uno recibirá (1/4) de la energía conducida.

La nueva información es almacenada en un arreglo bidimensional de manera temporal para ser utilizada en la siguiente iteración.

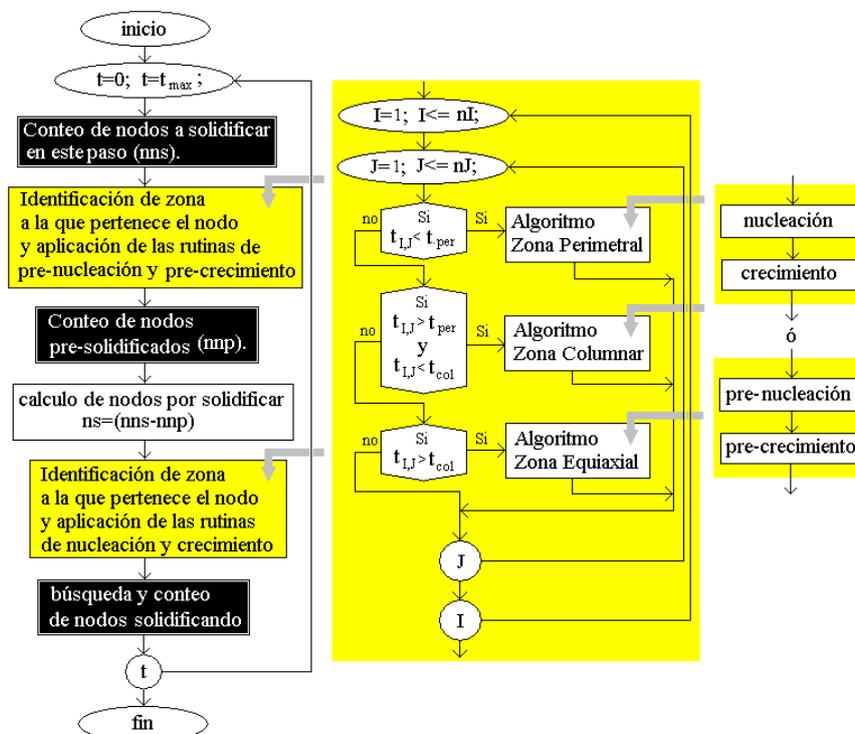


Fig. 7: Diagramas de flujo para el proceso de simulación

Es importante mencionar que las condiciones de búsqueda cambian en comparación con el proceso de crecimiento común como se ilustra en la figura (5b). Ya que en la pre-solidificación se encuentra un nodo con un cierto potencial para pre-crecer y si la condición de que este nodo puede ser pre-solidificado es verificada entonces se busca si existe algún vecino previamente solidificado que ya forme parte de un grano y se analiza la posibilidad de que forme parte de este. En caso de existir más de un nodo disponible para la pre-solidificación, se asignan probabilidades en función a su proximidad con el nodo pivote y se genera un número aleatorio para definir con cual crecerá.

En la figura (7) se muestran tres diagramas de flujo. El diagrama principal se encuentra del lado izquierdo y representa al proceso de simulación general y los subprocesos que se anidan en el ciclo principal del tiempo (t). En el diagrama del centro se presenta la rutina de identificación que ubica al nodo como parte de alguna de las zonas de granos que se forman en la sección.

Obviamente cada nodo puede pertenecer solamente a una zona en específico ya sea a la perimetral, a la columnar o a la equiaxial. Las sentencias ó condiciones "if" son empleadas para esto y para el establecimiento de las condiciones de probabilidad para los procesos de nucleación y crecimiento. Además como se puede observar esta rutina es anidada en el proceso principal dos veces ya que se emplea para incluir las rutinas de solidificación y pre-solidificación después de los conteos de nodo solidificados.

Finalmente en la columna de la derecha se presenta la opción para ejecutar las rutinas de solidificación y pre-solidificación correspondientes a cada zona de granos y con las condiciones de búsqueda y de criterio correspondientes.

SIMULACIONES REALIZADAS

Al emplear algoritmos de solidificación para la simulación del crecimiento de grano existe un único frente de avance. El cual es concéntrico y perfectamente definido como el que se muestra en las figuras (8a) a (8c) y coincide geoméricamente con el perfil de nodos que pasan al estado sólido.

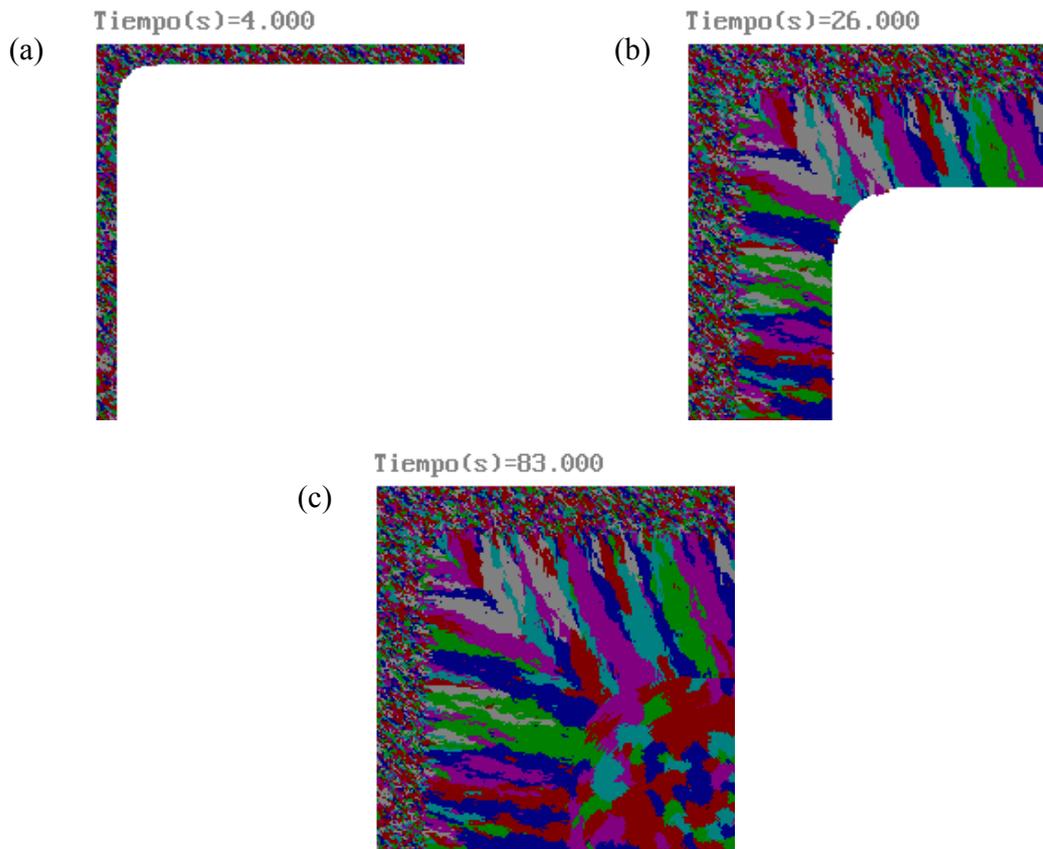


Fig. 8: Evolución del proceso de crecimiento de grano considerando únicamente los algoritmos de solidificación (nucleación y crecimiento).

Mientras que cuando se emplean algoritmos de pre-solidificación se presentan múltiples frentes de solidificación, debido al establecimiento de nuevos granos que pre-nuclean y pre-crecen. La morfología de los granos en las zonas columnar y equiaxial se ven también modificadas debido al encuentro entre diferentes frentes de solidificación de diferentes granos.

En las figuras se (9a) a (9c) se observa la evolución del crecimiento de granos en la primera se aprecia la formación de la zona perimetral, en la segunda figura se aprecia la formación de la zona columnar. Aquí se generan granos pre-nucleados que comienzan a crecer formando múltiples frentes de avance en la misma dirección que en flujo de calor (contraria a aquellos que fueron nucleados de manera natural). Finalmente en la figura (8c) se observa que se comienzan a formar granos pre-nucleados con múltiples frentes de avances en la zona equiaxial. Pero su aquí ya no hay una dirección de crecimiento preferencial.

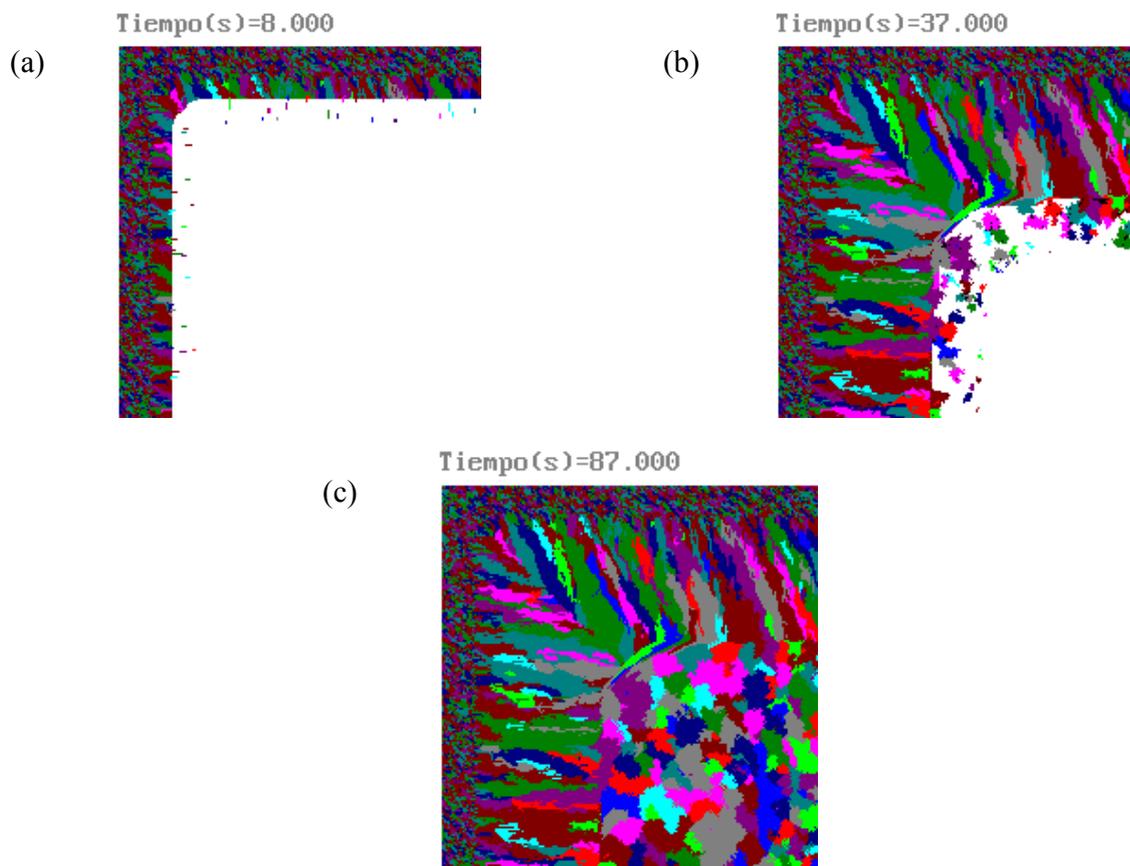


Fig. 9: Evolución del proceso de crecimiento de grano incluyendo los algoritmos de pre-solidificación (pre-nucleación y pre-crecimiento).

En la zona perimetral hay una probabilidad mucho mayor de que un nodo nucleee de manera independiente en comparación con la de crecer. Debido a que la velocidad de solidificación es muy alta. Aquí las rutinas de pre-solidificación no son incluidas ya que no considera posible que un nodo pre-solidifique tan rápido. Mientras que en las zonas columnar y equiaxial hay una probabilidad mayor de que los nodos crezcan debido a que permanecen un mayor tiempo en estado pastoso.

REGIONES DE TRANSICIÓN

Una gran cantidad de nodos solidificados es encontrada cerca de la zona en la frontera entre las zonas perimetral y columnar. Al iniciarse la solidificación en la zona columnar, la gran cantidad de nodos que crecen de manera simultánea en la zona perimetral, evita el crecimiento lateral, por lo que la dirección preferencial de crecimiento se da en forma perpendicular a las superficies de la sección y en sentido contrario al flujo de calor. Debido a que existe una fracción sólida alta en los nodos vecinos que se encuentran en esta dirección.

La zona columnar comienza a formarse en los nodos cuyo tiempo de residencia en estado pastoso es mayor a (2s.). Todos los nodos que comienzan a crecer y forman una zona de transición entre las zonas perimetral y columnar son inicialmente nucleados de igual manera que en la zona perimetral pero su crecimiento lateral se ve interrumpido por los nodos vecinos que han sido nucleados simultáneamente. Sin embargo su crecimiento se da en una dirección perpendicular a la superficie de la sección y contraria al flujo de calor que esta siendo extraído. El crecimiento columnar es promovido formando frentes de avance debido a que existe una fracción sólida considerablemente alta en los nodos próximos a los pivotes que han sido previamente solidificados. Razón por la cual es probable que un nodo solidificado crezca en esta dirección.

Cerca de las esquinas de la sección el crecimiento de los granos columnares también es interrumpido por los granos que crecen simultáneamente en sentido perpendicular a estos y que chocan entre si.

IDENTIFICACIÓN DE INTERFACES ENTRE GRANOS

La información de los granos es guardada y ordenada en arreglos computacionales que forman imágenes de las estructuras de grano. Esta información puede ser desplegada en pantalla con la interpretación de los valores numéricos y formar una imagen de píxeles. Esta información también puede ser salvada para ser procesada nuevamente por diferentes paquetes de software. Este proceso es muy importante ya que a continuación se trata la creación de algoritmos para la identificación de interfaces entre granos y su conteo. El desarrollo de estas herramientas computacionales es de gran importancia ya que permitirá evaluar las características morfológicas de la estructuras de granos como el tamaño de grano y su distribución.

Ahora la estructura de grano generada es considerada como una muestra donde cada celda es identificada por un código numérico. Por lo que las interfaces entre los granos son fácilmente identificables si los valores numéricos de los nodos en análisis y sus vecinos son diferentes; es decir si hay una discontinuidad entre estos. Un proceso para esta identificación puede ser programado en un par de ciclos independientes para cada eje horizontal y vertical incluyendo la verificación de alguna de la siguientes condiciones: si $(C_{i,j} \neq C_{i+1,j})$ ó si $(C_{i,j} \neq C_{i,j+1})$.

Posteriormente se marca la posición de la interfase entre los granos con un pixel de color distintivo y se elimina el color de última secuencia constante que identifica al grano anterior para proporcionar contraste. El resultado es una imagen nueva que representa a todos las interfaces entre los granos como la mostrada en la figura (10). Este nuevo arreglo de valores puede ser también salvado para tratamientos posteriores que proporcionen información para crear despliegues de formación de granos dinámicos y también para emplearlos con rutinas de acercamiento y selección de regiones.

Este mismo algoritmo puede ser utilizado añadiendo un contador cuando alguna de estas condiciones se cumpla para calcular el número de granos que hay a cada posición horizontal y vertical de la sección. Este procedimiento es útil también para calcular el tamaño de grano particular de una región seleccionada.

Además estas rutinas pueden utilizarse para determinar la longitud de las interfaces y las áreas de cada grano estableciendo una escala con equivalencia entre las dimensiones de la sección simulada y las celdas del arreglo.

El primer paso es saber el número de interfaces promedio (nip) que hay en la imagen; para esto se realiza un conteo para identificar el número de interfaces (ni_i) a cada posición perpendicular sobre el eje en análisis y se divide entre el número de nodos utilizado para la discretización; resolviendo la ecuación (23), posteriormente se resuelve la igualdad (24). Donde la longitud real de la muestra ($L_{muestra}$) es utilizada para calcular el tamaño de grano (GZ) en unidades de longitud reales. Aquí el sub-índice (i) se utiliza para indicar a que eje esta referido el análisis realizado.

$$nip = \frac{\sum_{i=1}^{I=nI} ni_i}{nI} \tag{23}$$

$$GZ_i = \frac{L_{muestra} * nip}{nI} \tag{24}$$

Finalmente el tamaño de grano promedio de la muestra (GZ_m) se puede obtener de la suma de todos los tamaños de grano parciales a lo largo del eje de referencia resolviendo la ecuación (25). La cual refiere al eje horizontal. Sin embargo el tamaño de grano puede ser diferente en función a la región que analiza y a la orientación del grano por lo que la rutina que realiza este cálculo puede ser modificada intercambiando los valores de (I) por (J) en las ecuaciones (23) a (25) para un análisis con referencia al eje vertical.

$$GZ_m = \sum_{I=1}^{I=nI} GZ_i \tag{25}$$

Los conteos de las interfaces pueden realizarse también para ambos ejes de manera conjunta como se ilustra en la figura (10). El procedimiento es útil también para conocer la relación entre la longitud de las interfases y el tamaño de grano. En esta figura se muestra también la aplicación de una rutina de ampliación para que el usuario pueda identificar las interfases en los granos pequeños de la zona perimetral.

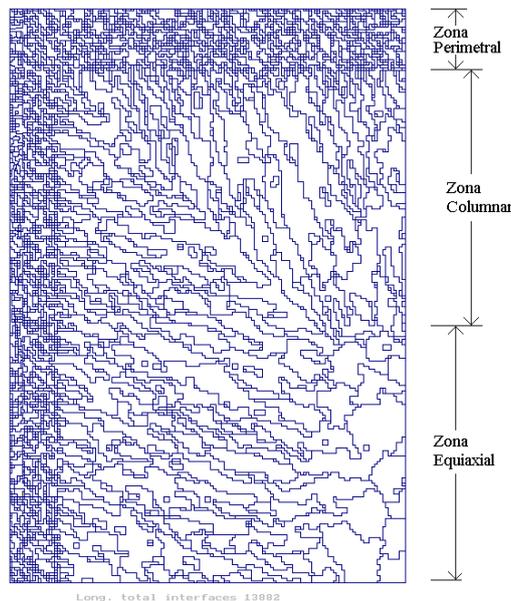


Fig. 10: Imagen de estructura de grano después de aplicar un filtro para identificar las interfaces entre granos

Adicionalmente las rutinas para reconstrucción tridimensional de la historia térmica y las rutinas de clasificación de tiempos pueden utilizarse para tratar los datos resultantes del autómata celular ó de la rutina de identificación de interfaces entre granos junto con los algoritmos de despliegue para obtener cortes que sirven para la identificación de la formación de los granos como se ilustra en la figura (11). Aquí se pueden identificar con precisión el momento en el cual se formaron cada una de las zonas y la morfología de grano resultante en cada una de ellas.

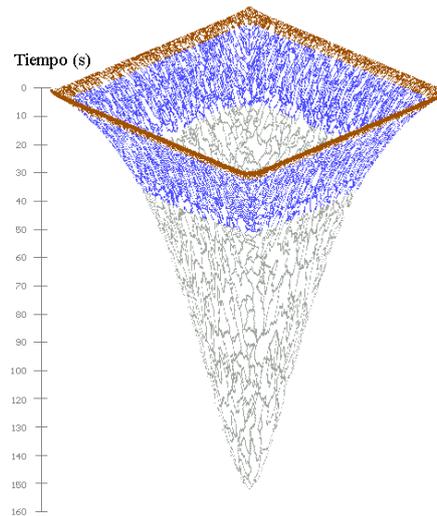


Fig. 11: Despliegue tridimensional para la formación de granos en función al tiempo

CONCLUSIONES

Aunque en las figuras (8) y (9) se muestra solamente (1/4) de la sección colada; los algoritmos desarrollados en el presente trabajo son capaces de simular una sección completa con condiciones asimétricas de solidificación. En comparación con otros autores (Ruhul Amin y Anurag, 2006; Randle et al., 2008; Shin y Hong, 2002; Zhang et al., 2003; Liu et al., 2006; Yoshioka et al., 2004; Ivasishin et al., 2003; Raabe; 1998; Crank y Nicholson, 1947; Fachinotti y Cardona, 2003; Zhu et al., 2001) que habían simulado la formación de la estructura considerando modelos muy simplificados y tratando el problema de crecimiento de grano de manera independiente. Esto es debido a que los algoritmos de nucleación y crecimiento así como las rutinas de búsqueda pueden identificar a los vecinos participantes en los procesos de solidificación y pre-solidificación y asignarles probabilidades de crecimiento congruentes a su análisis

El sistema de simulación desarrollado utiliza los datos resultantes del el cálculo térmico para generar una estructura de grano mediante el empleo de métodos estocásticos con lo cual se integran ambos procedimientos de cálculo y no se tratan separadamente como otros autores lo habían manejado (Brimacombe et al., 1980; Choudhary et al., Mazumdar, 1993; Choudhary y Mazumdar; 1994; Louhenkilpi et al., 1993; Louhenkilpi; 1995; Ruhul Amin y Anurag, 2006; Randle et al., 2008; Shin y Hong, 2002; Zhang et al., 2003; Liu et al., 2006; Yoshioka et al., 2004; Ivasishin et al., 2003; Raabe; 1998; Crank y Nicholson, 1947; Fachinotti y Cardona, 2003; Zhu et al., 2001).

Los algoritmos desarrollados permiten que la simulación de la formación de la estructura de grano sea realizada de manera dinámica en función a los tiempos de solidificación, por lo que también se puede visualizar la animación del proceso.

Los procesos de nucleación y crecimiento fueron apropiadamente simulados.

La inclusión de las rutinas de pre-solidificación permite obtener una morfología más aproximada a la estructura de grano que se forma en las zonas columnar y equiaxial.

Las regiones de transición son fácilmente identificables y muestran claramente el cambio en las condiciones y los algoritmos empleados en cada zona (perimetral columnar y equiaxial).

La morfología y orientación de los granos en las tres zonas a simular es muy aproximada a la que se encuentra en la realidad.

Las rutinas para identificación de las interfases y el conteo de estas también probó ser eficiente y cumplir con sus funciones de caracterización.

AGRADECIMIENTOS

Los presentes autores manifiestan su agradecimiento a las instituciones: Consejo Nacional de Ciencia y Tecnología CONACYT, Instituto Politécnico Nacional (IPN-COFAA) y a la Universidad Autónoma Metropolitana.

REFERENCIAS

Brimacombe, J.K.; Agarwal, P.K.; Baptista, L.A.; Hibbins S.; Prabhakar, B. (1980); *Spray cooling in the continuous casting of steel*, In proceedings 63rd National Open Hearth and Basic Oxygen Steel Conference, Washington, U.S.A.

Choudhary, S.K.; Mazumdar D.; Ghosh A. (1993); *Mathematical modelling of heat transfer phenomena in continuous casting of steel*, ISIJ International: 33(7), 764-774.

Choudhary, S.K.; Mazumdar D. (1994); *Mathematical modelling of transport phenomena in continuous casting of steel*, ISIJ International: 34(7), 584-592.

Crank, J.; Nicholson, P. (1947); *A practical method for numerical evaluation of solutions of partial differential equations of the heat conduction type*, in: Proceedings of the Cambridge Philosophical Society, vol. 43, p. 50-64.

Fachinotti, V.D.; Cardona, A. (2003); *Constitutive Models for steel under continuous casting conditions*, J. Mater. Process. Technol.: 135(1), 30-43.

Flemings, M.C. (1974); *Solidification Processing*, New York Ed., McGraw Hill 288 Book Co.

Ivasishin, O.M.; Shevchenko, S.V.; Vasiliev, N.L. (2003); *3D Monte-Carlo simulation of texture-controlled grain growth*, Acta Mater.: 51, 1019-1034.

Liu, D.R.; Guo, J.J.; Wu, S.P.; Su, Y.Q.; Fu, H.Z. (2006); *Stochastic modeling of columnar-to-equiaxed transition in Ti-(45-48 at%) Al alloy ingots*, Materials Science and Engineering A: 415, 184-194.

Louhenkilpi, S.; Laitinen, E.; Nienminen, R. (1993); *Real-Time Simulation of Heat Transfer in Continuous Casting*. Metall. Trans. B: 24B, 685-693.

Louhenkilpi, S. (1995); *Simulation and Control of Heat Transfer in Continuous Casting of Steel*, Acta Polytechnica Scandinavica: Chemical Tech. Series No. 230.

Raabe, D. (1998); *Computational Materials Science (the simulation of materials microstructure and properties)*, Ed. WILEY, printed in Germany, pp. 200-215.

- Ramírez, A.; Morales R.; Ramos A.; Solorio G. (2006a); *Desarrollo de simuladores para procesos industriales parte I (colada continua)*, Revista de Metalurgia: 42(3), 203-208.
- Ramírez, A.; Morales R.; Ramos A.; Solorio G. (2006b); *Desarrollo de simuladores para procesos industriales parte II (colada continua)*, Revista de Metalurgia: 42(3), 209-215.
- Ruhul Amin, M.; Anurag, M. (2006); *Modeling of turbulent heat transfer during the solidification process of continuous castings*, J. Mater. Process. Technol.: 174, 155–166.
- Randle, V.; Rios, P.R.; Hu, Y. (2008); *Grain growth and twinning in nickel*, Scripta Materialia: 58, 130-133.
- Savage, J.; Pritchard, W.H. (1954); *The problem of rupture of the billet in the continuous casting of steel*, J. Iron Steel Inst.: 178, 269-277.
- Shin, Y.H.; Hong, C.P. (2002); *Modeling of Dendritic Growth with Convection Using a Modified Cellular Automaton Model with a Diffuse Interface*, ISIJ: 42(4), 359–367.
- Yoshioka, H.; Tada, Y., Hayashi, Y. (2004); *Crystal growth and its morphology in the mushy zone*, Acta Materialia: 52, 1515–1523
- Zhang, L.; Zhang, C.B.; Wang, Y.M.; Wang, S.Q.; Ye, H.Q. (2003); *A cellular automaton investigation of the transformation from austenite to ferrite during continuous cooling*, Acta Materialia: 51, 5519–5527
- Zhu, M.F.; Kim, J.M.; Hong, C.P. (2001); *Modeling of Globular and Dendritic Structure Evolution in Solidification of an Al–7mass%Si Alloy*, ISIJ: 41(9), 992–998.