



**POSGRADO INTERINSTITUCIONAL DE CIENCIA Y TECNOLOGÍA**

---

**SIMULACIÓN NUMÉRICA DEL TRATAMIENTO  
TÉRMICO DE CARBURIZADO Y TEMPLE DE ACEROS  
DE BAJA ALEACIÓN**

**TESIS**

QUE PARA OBTENER EL GRADO

ACADÉMICO DE

**MAESTRO EN CIENCIA Y**

**TECNOLOGÍA**

**EN LA ESPECIALIDAD DE**

**DISEÑO MECÁNICO**

PRESENTA

**FIDEL MARTÍNEZ OLVERA**

SANTIAGO DE QUERÉTARO, QUERÉTARO, DICIEMBRE 2019



## RESUMEN

Esta tesis se enfocó en el desarrollo de un modelo que describe los fenómenos de transferencia de calor y masa para simular el tratamiento térmico de carburizado y temple en aceros de baja aleación. El modelo partió de la modificación de un código computacional denominado CONDUCT (acrónimo de “heat CONduction and DUCT flow”), que solo es útil para la representación de cantidades escalares en dominios de cálculo con geometría regular, por lo que fue necesario modificarlo para que represente dominios no ortogonales, debido a que en la realidad son los más comunes. Para lograrlo se discretizó la ecuación diferencial parcial general de transporte bidimensional en el interior y en las fronteras de un dominio computacional mediante el método numérico del volumen finito, por lo que se hizo el cambio de un dominio físico o real a un dominio computacional, es decir, se cambió de ejes coordenados  $x$  y  $y$  a ejes  $\xi$  y  $\eta$ , aplicando la regla de la cadena e involucrando el teorema de la divergencia sobre el interior del volumen de control, para obtener así una integral de superficie en un área cerrada. Una vez que se obtuvieron los coeficientes de la ecuación discretizada que involucran los dominios no ortogonales, se implementaron en la subrutina de la parte invariante del código, donde están contenidos los cálculos generales que son comunes a todas las posibles aplicaciones. Se incluyó en la subrutina de la parte adaptativa del código la especificación para cada tipo de problema, con detalles acerca de la geometría, condiciones iniciales de las variables dependientes, propiedades térmicas consideradas constantes, criterios de convergencia e inicio o fin de la resolución de la ecuación discretizada general, además de la impresión de las variables dependientes y las condiciones a la frontera del problema, así como también las funciones que provienen de la modificación a dominios no ortogonales y que son llamadas por la parte invariante.

Después, se reprodujo un problema tipo con diferentes condiciones a la frontera y propiedades térmicas constantes y variables para un sistema de coordenadas ortogonales planteado en el manual del usuario de CONDUCT, del cual, una vez que se realizó, se obtuvieron los mismos resultados reportados en el manual, asegurando así que el modelo es apropiado para ambos dominios, es decir, ortogonales y no ortogonales. Posteriormente, se reprodujeron cuatro esquemas de tratamiento

termoquímico de carburizado y difusión publicados en la literatura, para obtener el perfil de concentración de carbono en función de la distancia desde la superficie, en los cuales, debido a la información parcial de condiciones de tratamiento, se hicieron suposiciones con base en referencias disponibles para problemas similares, obteniendo buena concordancia entre los resultados publicados y los del modelo, considerando así validado el modelo.

Además de la validación por comparación con datos de la literatura, el modelo también fue validado experimentalmente, para lo cual se consideró una pieza real bajo condiciones de tratamiento térmico de carburizado y temple conocidas, haciendo mediciones en un comparador óptico para, a partir de ellas, encontrar las ecuaciones que mejor se ajustan a la geometría no ortogonal de esta y, así, obtener la mejor representación del dominio de cálculo para la simulación. En lo que respecta a las propiedades térmicas del material, estas fueron consideradas como constantes y también como variables, con base en información disponible en la literatura para algún material similar al de este estudio, en donde, en algunos casos, para conocer dicha propiedad se digitalizaron gráficas y se encontró la ecuación con el mejor coeficiente de correlación; así, para cada iteración el modelo actualiza la información previa para cada variable dependiente en condiciones de estado transitorio. En cuanto a la parte experimental, lo primero fue analizar químicamente el material y corroborar que cumple con la especificación para este material. Posteriormente, se analizó la concentración de carbono en la capa carburizada a una distancia de 0.1 mm desde la superficie, prosiguiendo a intervalos de 0.1 mm hasta llegar a 2 mm de profundidad, y se realizaron mediciones de dureza por microindentación en escala Vickers en la capa carburizada y núcleo, haciendo una conversión a escala Rockwell C (HRC) directamente en el equipo. Finalmente, se compararon los resultados del modelo y los experimentales, obteniendo buena concordancia entre ambos, respecto del contenido de carbono en función de la distancia y de las mediciones de dureza Vickers, las cuales se pueden calcular debido a la distribución de carbono en el carburizado y difusión y de la velocidad de enfriamiento a 700 °C en el temple.

## ABSTRACT

This thesis was focused on the development of a model that describes the phenomena of heat and mass transfer to simulate the thermal treatment of carburizing and quenching in low alloy steels. The model was based on the modification of a computational code called CONDUCT (acronym for “heat CONduction and DUCT flow”), which is only useful for the representation of scalar quantities in calculation domains with regular geometry, so it was necessary to modify it to represent non-orthogonal domains, because in real life they are the most common. To achieve this the general partial differential equation in two space coordinates inside and at the boundaries of a computational domain was discretized by means of the numerical method of finite volume, so the change from a physical or real domain to a computational domain was made, that is, it was changed from an  $x$  and  $y$  coordinate system to a  $\xi$  and  $\eta$  one, applying the chain rule and involving the divergence theorem inside of the control volume, to obtain a surface integral in a closed area. Once the coefficients of the discretized equation involving non-orthogonal domains were obtained, they were implemented in the subroutine of the invariant part of the code, which contains the general calculation scheme that is common to all possible applications; in addition, the specification for each type of problem was included in the subroutine of the adaptive part of the code with details about the geometry, initial conditions of the dependent variables, thermal properties considered constant, convergence criteria and run or stop to solve the general discretization equation, besides to the printing of the dependent variables and boundaries conditions, as well as the functions that come from the modification to non-orthogonal domains and that are called by the invariant part.

Then, a problem designed in the CONDUCT textbook with different boundary conditions and constant and variable thermal properties was run for an orthogonal coordinate system, in which, once it was performed the same results were obtained, ensuring that the model is appropriate for both orthogonal and non-orthogonal domains. Subsequently, four schemes of thermochemical carburizing and diffusion treatment published in the literature were run to obtain the carbon concentration profile as a function of distance from the surface, in which, due to incomplete information on treatment conditions, assumptions were made based on references for similar problems,

obtaining good agreement between the published results and those of the model, thus considering the model validated.

In addition to the validation by comparison with the literature, the model was also experimentally validated, for which a workpiece was considered under known conditions of heat treatment of carburizing and quenching, making measurements in an optical comparator to find the equations that best fit the non-orthogonal geometry from them and thus obtain the best representation of the calculation domain for the simulation. About the thermal properties of the material, these were considered as constant and variable, based on information available in the literature for some material similar to that of this study, which in some cases to know a property a graphic digitization was performed and an equation with the best correlation coefficient was found; thus, for each iteration the model updates the previous information for each dependent variable in transient conditions. About experimental validation, the first step was to chemically analyze the material and verify that it complies with the specification for this material. Subsequently, the carbon concentration in the carburized case was analyzed each 0.1 mm from the surface up to 2 mm deep, and hardness measurements were made by microindentation in Vickers scale in the carburized case and core, making a Rockwell C scale conversion (HRC) directly on the hardness tester display. Finally, the model and the experimental results were compared, and a good agreement has been achieved between the calculated and the experimental data, respect to the carbon concentration as a function of the distance and in the Vickers hardness measurements, which can be simulated due to the carbon distribution in the carburizing and diffusion stage and the cooling rate at 700 ° C in quenching.

# ÍNDICE DE CONTENIDO

RESUMEN .....	i
ABSTRACT .....	iii
ÍNDICE DE CONTENIDO.....	v
ÍNDICE DE TABLAS .....	ix
ÍNDICE DE FIGURAS O GRÁFICAS .....	xi
ÍNDICE DE ANEXOS .....	xv
NOMENCLATURA .....	xvii
AGRADECIMIENTOS .....	xxi
<b>1. INTRODUCCIÓN.....</b>	<b>1</b>
1.1 ANTECEDENTES.....	1
1.1.1 Modelo de carburizado .....	1
1.1.2 Modelo del temple .....	10
1.1.2.1 Campo de temperatura .....	11
1.1.2.2 Campo de microestructura .....	14
1.1.2.2.1 Transformación con difusión o isotérmica.....	14
1.1.2.2.2 Transformación sin difusión o atérmica .....	17
1.1.2.3 Campo de esfuerzos / deformaciones.....	20
1.1.3 Simulación de carburizado y temple: análisis de la literatura .....	23
1.1.3.1 Difusión de carbono .....	23
1.1.3.2 Distribución de temperatura .....	29
1.1.3.3 Microestructura .....	31
1.1.3.4 Esfuerzos / deformaciones.....	35
1.1.3.5 Dureza.....	38
1.1.4 Paquetes computacionales comerciales .....	40
1.2 DEFINICIÓN DEL PROBLEMA .....	42
1.3 JUSTIFICACIÓN.....	43
1.4 OBJETIVOS.....	43
1.4.1 General.....	43
1.4.2 Específicos .....	43
1.5 HIPÓTESIS.....	44
<b>2. MARCO TEÓRICO.....</b>	<b>45</b>
2.1 CARBURIZADO.....	45

2.1.1	Carburizado sólido .....	45
2.1.2	Carburizado líquido .....	46
2.1.3	Carburizado gaseoso .....	47
2.1.4	Equipo para carburizado gaseoso .....	48
2.1.4.1	Hornos tipo batch .....	48
2.1.4.2	Hornos continuos.....	48
2.1.5	Variables del proceso de carburizado.....	48
2.1.5.1	Temperatura .....	49
2.1.5.2	Tiempo.....	50
2.1.6	Composición de la atmósfera .....	50
2.2	TEMPLE .....	52
2.2.1	Formación de Martensita .....	53
2.2.1.1	Estructura cristalina de la martensita.....	55
2.2.1.2	La cristalografía de la transformación martensítica .....	55
2.2.2	Martensita revenida .....	56
2.3	SIMULACIÓN NUMÉRICA .....	57
2.3.1	Diferencias finitas.....	59
2.3.2	Elemento finito .....	65
2.3.3	Volumen finito .....	71
2.3.4	Solución de las ecuaciones algebraicas .....	86
2.3.5	Coordenadas ajustadas al cuerpo .....	90
<b>3.</b>	<b>METODOLOGÍA DE INVESTIGACIÓN .....</b>	<b>93</b>
3.1	SISTEMA DE ESTUDIO .....	93
3.2	ECUACIONES DE TRANSPORTE .....	93
3.2.1	Ecuación de conducción de calor .....	94
3.2.2	Ecuación de difusión (segunda ley de Fick).....	95
3.3	CONDICIONES INICIALES Y A LA FRONTERA .....	97
3.4	DISCRETIZACIÓN .....	102
3.5	IMPLEMENTACIÓN COMPUTACIONAL .....	108
3.6	VALIDACIONES .....	110
3.6.1	Literatura.....	110
3.6.1.1	Artículo: Experimental measurements and numerical simulation of stress and microstructure in carburized 5120 steel disks [2] .....	113



3.6.1.2	Artículo: Simulation of the influence of carbon profile and dimensions on distortion behaviour of SAE 5120 discs by using a design of experiment [3] ..	116
3.6.1.3	Artículo: Comparison of two finite element simulation codes used to model the carburizing of steel [5] .....	118
3.6.1.4	Artículo: Numerical simulation on carburizing and quenching of gear ring [9]	121
3.6.2	Experimental .....	125
3.6.2.1	Análisis químico .....	125
3.6.2.2	Dureza.....	125
<b>4.</b>	<b>RESULTADOS Y DISCUSIÓN.....</b>	<b>127</b>
4.1	VALIDACIÓN POR COMPARACIÓN CON MEDICIONES EXPERIMENTALES .....	127
4.1.1	Análisis químico .....	127
4.1.2	Dureza.....	130
4.1.3	Comparaciones modelo vs mediciones.....	133
4.1.3.1	Análisis químico .....	133
4.1.3.2	Dureza.....	137
<b>5.</b>	<b>CONCLUSIONES.....</b>	<b>153</b>
<b>6.</b>	<b>RECOMENDACIONES .....</b>	<b>155</b>
	REFERENCIAS.....	157
	APÉNDICE A -Discretización de la ecuación general de transporte .....	A.1



## ÍNDICE DE TABLAS

<b>Tabla 1.1</b> Ecuaciones empíricas para la difusividad de carbono en austenita [5].	6
<b>Tabla 3.1</b> Densidad de las fases $\alpha$ -ferrita, $\gamma$ -austenita y $\delta$ -ferrita a diferentes temperaturas [45].	94
<b>Tabla 3.2</b> Coeficientes de CONDUCT para un dominio ortogonal (columna izquierda) y modificación de estos para un dominio no ortogonal (columna derecha).	109
<b>Tabla 3.3</b> Análisis químico del acero 5120 antes del tratamiento de carburizado [2].	113
<b>Tabla 3.4</b> Composición química del acero AISI 5120.	118
<b>Tabla 4.1</b> Composición química del acero estudiado (engrane).	127
<b>Tabla 4.2</b> Composición química del acero estudiado cada 0.1 mm desde la superficie en % wt.	129
<b>Tabla 4.3</b> Resultados de dureza Vickers (HV) con conversión directa del equipo a dureza Rockwell (HRC) en los 4 dientes (D1 - D4).	132
<b>Tabla 4.4</b> Resultados del contenido de carbono promedio medido experimentalmente y calculado en función de la distancia desde la superficie.	135
<b>Tabla 4.5</b> Rangos de concentración de los elementos para las Ecuaciones (4.5) a (4.8).	138
<b>Tabla 4.6</b> Condiciones adicionales para el rango de aplicación de las Ecuaciones (4.5) a (4.8).	139
<b>Tabla 4.7</b> Variables calculadas para la determinación de dureza y valores de dureza Vickers (HV) y Rockwell C (HRC) calculados.	144
<b>Tabla 4.8</b> Resultados promedio de austenita retenida en cuatro campos por diente y por distancia, y valor promedio de los cuatro dientes (D1 - D4) por cada distancia.	146
<b>Tabla 4.9</b> Resultados de dureza para el modelo de la Ecuación (4.10).	149



## ÍNDICE DE FIGURAS O GRÁFICAS

<b>Figura 1.1</b> Ilustración esquemática de las interacciones codependientes entre temperatura, transformación de fases y esfuerzo / deformación [6]. .....	10
<b>Figura 1.2</b> División en intervalos de tiempo de la curva de enfriamiento superpuesta sobre el diagrama TTT de un acero eutectoide bajo condiciones isotérmicas [23]. .....	16
<b>Figura 1.3</b> Distribución de carbono en función de la profundidad desde la superficie, y efecto de la geometría en la profundidad de capa [14]. .....	26
<b>Figura 1.4</b> Comparación de perfil de carbono medido y simulado (valores promedio con dispersión formando una banda) [3]. .....	28
<b>Figura 1.5</b> Historiales de temperatura para un cilindro de acero 1080 de 38 mm de diámetro templado en agua, mostrando el efecto del calor latente [22]. .....	30
<b>Figura 1.6</b> Historial de la formación martensítica a diferentes profundidades durante el temple [8]. .....	34
<b>Figura 1.7</b> Simulación de la evolución de esfuerzos durante el temple [8]. .....	36
<b>Figura 1.8</b> Comparación entre los perfiles de dureza calculados (líneas continuas) y experimentales (símbolos) después del tratamiento térmico de carburizado para el caso 1 (rojo) y caso 2 (azul) [15]. .....	39
<b>Figura 2.1</b> Nodos distribuidos uniformemente en el plano Cartesiano en una y dos dimensiones por el método de diferencias finitas (los círculos negros denotan los nodos de frontera y los blancos al interior del dominio denotan los nodos computacionales) [36]. .....	60
<b>Figura 2.2</b> Representación de diferencias finitas de las derivadas de primer orden para $\partial\phi/\partial x$ [36]. .....	63
<b>Figura 2.3</b> Engrane con geometría irregular [14]. .....	66
<b>Figura 2.4</b> Suposición de perfiles: a) escalonado, y b) lineal por partes [40]. .....	72
<b>Figura 2.5</b> Distancias asociadas con la interface $e$ [40]. .....	76
<b>Figura 2.6</b> Dominios: a) físico, y b) computacional [42]. .....	90
<b>Figura 3.1</b> a) Engrane de acero ETN-22, carburizado, templado en aceite y revenido, el cual muestra el dominio de cálculo (izquierda), y b) división por zonas en el comparador óptico (derecha). .....	93

<b>Figura 3.2</b> Diagrama esquemático del tratamiento termoquímico de carburizado al que fue sometido el acero ETN-22 de este estudio. ....	96
<b>Figura 3.3</b> Gráfica del coeficiente de transferencia de calor por convección del medio de temple [9]. ....	101
<b>Figura 3.4</b> Representación de los volúmenes de control en el dominio de cálculo para la mitad de un diente carburizado en a) el dominio físico o real y b) el dominio computacional. ....	105
<b>Figura 3.5</b> Representación de un problema tipo para un sistema en coordenadas ortogonales. ....	111
<b>Figura 3.6</b> Gráficas de temperatura en función de la posición de los nodos a) $l=4$ y b) $l=12$ . ....	112
<b>Figura 3.7</b> Proceso de tratamiento térmico en dos etapas: carburizado (a $900\text{ }^{\circ}\text{C}$ ) y difusión (a $840\text{ }^{\circ}\text{C}$ ). ....	113
<b>Figura 3.8</b> Determinación del contenido de carbono en función de la distancia por combustión [2], difracción de rayos-X [2] y calculados. ....	115
<b>Figura 3.9</b> Corte transversal de la pieza carburizada, mostrando el dominio de cálculo (sección rectangular derecha) donde se realizó la simulación [3]. ....	116
<b>Figura 3.10</b> Comparación de los perfiles de carbono experimental [3] y calculado. ...	117
<b>Figura 3.11</b> a) Dominio de cálculo de la pieza cilíndrica con mallado fino en los bordes y b) ubicación del perfil de carbono de A a B. ....	120
<b>Figura 3.12</b> Comparación de los perfiles de carbono obtenidos por las subrutinas CTDT [5], DANTE [5] y los calculados. ....	121
<b>Figura 3.13</b> Proceso de carburizado para tres diferentes tiempos 360, 180 y 90 minutos, con un tiempo de difusión de 50 minutos [9]. ....	122
<b>Figura 3.14</b> a) Anillo dentado y b) mallado de elemento finito de la mitad de un diente [9]. ....	123
<b>Figura 3.15</b> Distribución del contenido de carbono en la simulación del carburizado para 360 minutos. ....	124
<b>Figura 3.16</b> Distribución del contenido de carbono en la simulación del carburizado para 180 minutos. ....	124
<b>Figura 3.17</b> Distribución del contenido de carbono en la simulación del carburizado para 90 minutos. ....	125

<b>Figura 4.1</b> Maquinado de la pieza cada 0.1 mm desde la superficie. ....	128
<b>Figura 4.2</b> Distancia desde la superficie del diente al centro de cada indentación (magnificación 50 X, sin ataque). ....	131
<b>Figura 4.3</b> Profundidad de capa efectiva a 550 HV para los cuatro dientes ensayados. ....	133
<b>Figura 4.4</b> Distribución de los volúmenes de control en el dominio de cálculo físico o real. ....	134
<b>Figura 4.5</b> Perfil de la concentración de carbono obtenido experimentalmente y calculado por el modelo.....	136
<b>Figura 4.6</b> Medición de dureza en la mitad del diente de la pieza estudiada (rombos) y posición de los nodos que coinciden con las indentaciones de dureza en la simulación (cuadrados) (magnificación 50 X, sin ataque). ....	140
<b>Figura 4.7</b> Valores de la temperatura a través del tratamiento térmico completo en el nodo (2,71) situado a 0.1 mm de distancia desde la superficie.....	141
<b>Figura 4.8</b> Curva de temperatura en función del tiempo (escala logarítmica) empleada para la determinación de la velocidad de enfriamiento en el temple a una temperatura de 700 °C para el nodo (2,71).....	142
<b>Figura 4.9</b> Comparación de las curvas de dureza Vickers calculadas con las Ecuaciones (4.1) - (4.2) [57] y medidas experimentalmente. ....	145
<b>Figura 4.10</b> Cuantificación de austenita retenida por análisis de imágenes (magnificación 1000X, ataque con Nital al 3 %). ....	147
<b>Figura 4.11</b> Microestructuras en la superficie y centro de un diente (magnificación 1000X, ataque con Nital al 3 %). ....	147
<b>Figura 4.12</b> Comparación de las curvas de dureza en escala Rockwell C calculadas con la Ecuación (4.9) y experimentales reportadas directamente del durómetro. ....	148
<b>Figura 4.13</b> Comparación de las curvas de dureza en escala Vickers calculadas con la Ecuación (4.10) y las experimentales.....	150
<b>Figura 4.14</b> Comparación de las curvas de dureza en escala Rockwell C calculadas con la Ecuación (4.9) y experimentales reportadas directamente del durómetro. ....	151

**Figura A.1** Configuración de un volumen de control en el cual se observan las fronteras  $s_1$  a  $s_4$  y el vector unitario  $\mathbf{n}$  en el dominio computacional [47]. .....A.3

**Figura A.2** Representación ortogonal en el dominio computacional para determinación de la variable dependiente  $\phi$  en el nodo interior P delimitado por las caras 1-4 de un volumen de control.....A.9

**Figura A.3** Representación del flujo en la cara izquierda  $s_1$  del dominio de cálculo para la ecuación general de transporte en el nodo  $\phi_{1,\eta}$ . .....A.16

**Figura A.4** Representación del flujo en la cara derecha  $s_3$  del dominio de cálculo para la ecuación general de transporte en el nodo  $\phi_{L1,\eta}$ . .....A.17

**Figura A.5** Representación del flujo en la cara superior  $s_2$  del dominio de cálculo para la ecuación general de transporte en el nodo  $\phi_{\xi,M1}$ .....A.19

**Figura A.6** Representación del flujo en la cara inferior  $s_4$  del dominio de cálculo para la ecuación general de transporte en el nodo  $\phi_{\xi,1}$ .....A.20



## ÍNDICE DE ANEXOS

APÉNDICE A - Discretización de la ecuación general de transporte .....	A1
--	----



## NOMENCLATURA

$a_B, a_E, a_N, a_P, a_S, a_T, a_W$	Coeficientes de la ecuación discretizada por el método numérico del volumen finito, que representan la conductancia entre el punto $P$ y los nodos vecinos correspondientes.
$a_i$ ( $i = 0, 1, 2, \dots, 8$ )	Parámetros cinéticos de transformación de la Ecuación (1.29), (1.30) y (1.31).
$a_P, a_P^0$	Coeficientes de la ecuación discretizada en el punto $P$ .
$A, n$	Parámetros del material obtenidos desde diagramas de transformación isotérmica de la Ecuación (1.27).
$A_e$	Área de elemento triangular.
$b$	Término constante de la ecuación discretizada de volumen finito.
$b_i$ ( $i = 0, 1, 2$ )	Coeficientes de los polinomios de las Ecuaciones (2.29), (2.30) y (2.31).
$c$	Calor específico ( $J/kgK = m^2/s^2\text{°C}$ ).
$C, C_0, C_S, C_w$	Concentración de carbono al tiempo $t$ , concentración de carbono inicial ( $t = 0$ ), concentración de carbono superficial y potencial de carbono en la atmósfera carburizante, respectivamente (% wt).
$C_f, C_b, C_m$	Contenido de carbono de la ferrita, bainita y martensita, respectivamente.
$D, D_N$	Difusividad de carbono y nitrógeno en austenita, respectivamente ( $m^2/s$ ).
$D_0$	Factor pre-exponencial ( $m^2/s$ ).
$e$	Parámetros de interacción termodinámicos, Ecuación (1.8).
$E$	Módulo de Young ( $MPa = N/mm^2$ ).
$f, f_e$	Factores de interpolación con valores entre 0 y 1.
$f_C, f_P$	Variables para el flujo de difusión en la frontera.
$F_i, \hat{F}_{ij}$	Fracción en volumen de la $i$ -ésima fase (ferrita, perlita, bainita y martensita), y respecto del tiempo de la transformación de fase $i$ a $j$ , respectivamente.
$G$	Tamaño de grano austenítico.
$\hat{G}, k_h, \sigma_{kl}, \dot{\sigma}_{kl}, \sigma_{mn}$	Parámetros en las Ecuaciones (1.47), (1.48) y (1.49).
$h$	Coeficiente de transferencia de calor por convección ( $W/m^2 K = g/s^3\text{°C}$ ).
$i$	Inercia.

$h(F_{ij})$	Parámetro en la Ecuación (1.55).
$HV, HV_f, HV_b, HV_m$	Durezas en escala Vickers considerando cuatro fases (ferrita, perlita, bainita y martensita), solo ferrita, solo bainita y solo martensita, respectivamente.
$J$	Flujo de difusión.
$J_2^{1/2}$	Segundo invariante de esfuerzos cortantes en la Ecuación (1.41).
$k$	Conductividad térmica del material ( $W/mK = gm/s^3°C$ ).
$K_f, K_p, K_b, K_m$	Fracción en volumen de las fases ferrita, perlita, bainita y martensita, respectivamente, de un acero enfriado continuamente, en función de la temperatura de austenización.
$K_{ij}$	Coefficiente de transformación por deformación plástica con y sin difusión de la Ecuación (1.55).
$K_{LV}, n_{LV}$	Parámetros en función de la composición química para la determinación de la fracción de martensita en la Ecuación (1.38).
$M_s$	Temperatura de inicio de transformación martensítica.
$n_i$	Componente del vector unitario normal.
$n_{\alpha, Fe}, n_{\beta, Fe}, V_{\alpha}^T, V_{\beta}^T$	Parámetros en la Ecuación (1.57).
$N, N_0, N_s, N_w$	Concentración de nitrógeno al tiempo $t$ , concentración de nitrógeno inicial ( $t = 0$ ), concentración de nitrógeno superficial y potencial de nitrógeno en la atmósfera de nitruración, respectivamente (% wt).
$N_i (i = 1, 2, 3)$	Funciones de interpolación.
$N'$	Valor de comparación en la transformación de fases (ferrita, perlita, bainita y martensita).
$Q, Q_N$	Energía de activación de la difusión de carbono y nitrógeno en austenita, respectivamente.
$r_v$	Fuente de calor interno.
$R, R_c$	Constante de los gases ideales en unidades de ( $J/mol/K$ ) y ( $cal/mol/K$ ), respectivamente.
$R', W_i, D'$	Parámetros de las Ecuaciones (2.38) y (2.39).
$S_{ij}, S'_{ij}$	Esfuerzo desviatorio y cortante, respectivamente.
$S$	Rapidez de generación por unidad de volumen (también llamado término fuente de la cantidad física relevante).
$\bar{S}$	Valor promedio de $S$ .
$S_C, S_P$	Término constante y coeficiente de la variable dependiente en la Ecuación (2.51).
$S_f, S_p, S_b, S_m$	Variables de comparación en la Ecuación (4.3) y (4.4) para las fases ferrita, perlita, bainita y martensita, respectivamente.
$t, t_t$	Tiempo y tiempo de revenido, respectivamente.
$T, T_s, T_{\infty}, T_t$	Temperatura, temperatura superficial, temperatura del fluido y temperatura de revenido, respectivamente.
$u$	Variable de la Ecuación 1.4, $\left( = \frac{x}{2\sqrt{Dt}} \right)$ .
$T_A$	Temperatura de austenización ( $^{\circ}C$ ).

$v$	Razón de Poisson.
$v_c$	Velocidad de enfriamiento a 700°C.
$W_f, W_p, W_b, W_m$	Variable dependiente dicotómica que describe la ocurrencia en la microestructura del acero para ferrita, perlita, bainita y martensita, respectivamente.
$x, y, z$	Ejes coordenados para un dominio físico o real.
$x_c$	Fracción molar de carbono.
$y_c$	Variable de composición de la Ecuación (1.7) ( $= x_c/(1 - x_c)$ ).
$\Delta H_i$	Calor latente liberado por la fracción de volumen de la $i$ -ésima fase (ferrita, perlita, bainita y martensita).
$\Delta t$	Intervalo o escalón de tiempo que transcurre ( $s$ ).
$\Delta t_j$	Intervalo de tiempo para la transformación de fase en condiciones isotérmicas.
$\Delta T, \Delta \dot{T}$	Cambio y velocidad de cambio entre dos temperaturas (final e inicial), respectivamente.
$\Delta x, \Delta y, \Delta z$	Distancia mínima entre dos posiciones consecutivas en la dirección $x, y, z$ del dominio de cálculo (m).
$\Delta \eta$	Distancia mínima entre dos posiciones consecutivas en la dirección $\eta$ del dominio de cálculo ortogonal.
$\Delta \xi$	Distancia mínima entre dos posiciones consecutivas en la dirección $\xi$ del dominio de cálculo ortogonal.
$\alpha$	$= \beta^2 + 1$ .
$\alpha_e, \alpha_M, \alpha_A$	Coefficiente de expansión térmica: Ecuaciones (1.50) y (1.51), de la martensita y de la austenita, respectivamente.
$\alpha_m$	Constante en la ecuación empírica para la fracción en volumen de martensita ( $= 0.011 \text{ } ^\circ\text{C}^{-1}$ ).
$\alpha_r$	Factor de relajación.
$\beta$	$= \eta \frac{\partial \delta}{\partial \xi}$ .
$\beta_0$	Constante en la Ecuación (1.15).
$\beta_C, \beta_N$	El coeficiente de velocidad de reacción superficial o coeficiente de transferencia de masa para carbono y nitrógeno, respectivamente ( $m/s$ ).
$\beta_{ij}$	Dilatación debido al cambio de microestructura desde la fase $i$ a la fase $j$ en la Ecuación (1.54).
$\beta^T, \beta^0$	Coefficientes de expansión volumétrica para la transformación martensítica a cierta temperatura $T$ y a 0 °C, respectivamente, Ecuaciones (1.52) y (1.53).
$\gamma, \Lambda, \Psi, \Omega$	Términos en función de las derivadas parciales de la variable dependiente en un dominio ortogonal.
$\Gamma$	Coefficiente de difusión generalizado.
$\delta(x)$	Distancia en el eje $y$ del dominio real en función de $x$ en el modelo.
$\varepsilon$	Error relativo porcentual.
$\dot{\varepsilon}_{ij}, \dot{\varepsilon}_{ij}^e, \dot{\varepsilon}_{ij}^p, \dot{\varepsilon}_{ij}^T, \dot{\varepsilon}_{ij}^{tr}, \dot{\varepsilon}_{ij}^c, \dot{\varepsilon}_{ij}^{df}$	Velocidad de deformación total, elástica, plástica, térmica, por transformación de fase, por termofluencia, y por difusión, respectivamente.

$\eta$	Eje coordenado para un dominio computacional u ortogonal ( $= y/\delta$ ).
$l_i$	Calor latente producido por la $i$ -ésima fase (ferrita, perlita, bainita y martensita).
$\lambda$	Capacidad de almacenamiento por unidad de volumen.
$\xi$	Eje coordenado para un dominio computacional u ortogonal.
$\xi_i$	Fracción de volumen de la $i$ -ésima fase (ferrita, perlita, bainita y martensita) al tiempo $t$ .
$\rho$	Densidad, ( $g/m^3$ ).
$\rho H_2$	Presión parcial del hidrógeno en la Ecuación (1.15).
$\sigma_e, \sigma_{ij}, \sigma_m$	Esfuerzo equivalente, esfuerzos, esfuerzo medio.
$\delta_{ij}, \dot{\sigma}_{ij}, \dot{\sigma}_{kk}$	Parámetros de la Ecuación (1.44).
$\tau_j$	Tiempo en el cual inicia la transformación de fase en condiciones isotérmicas en el $j$ -ésimo $\Delta t$ .
$\phi$	Variable dependiente.
$\psi_i (i = 1,2, \dots, 6)$	Parámetros del material en las Ecuaciones (1.41) y (1.42).
$\mathbf{i}, \mathbf{j}$	Vectores unitarios ortogonales.
$\mathbf{n}$	Vector normal.
$\nabla$	Operador Nabla ( $= \frac{\partial}{\partial x} \mathbf{i} + \frac{\partial}{\partial y} \mathbf{j}$ ).
$\nabla\phi$	Gradiente del campo escalar o vector direccional perpendicular a la superficie.

## AGRADECIMIENTOS

Tu persistencia fue debilitada por circunstancias externas. Sin embargo, existía una fuente interna de calor latente negándose a desistir, avanzando con pies de plomo sobre la línea de acción del objetivo proyectado, tu perseverancia significó progreso, tomando el miedo como aliado y tolerante al cambio, bajo estos principios te doy las gracias a ti, **sistema de creencias** al día de la redacción de estas líneas, que ayudado con los verbos: queriendo y practicando, se llegó a terminar este trabajo.

También agradezco a mis padres por coincidir y hacer real mi existencia, a mis hijos Isaac y Josué ambos de apellidos Martínez Jiménez de 11 y 7 años respectivamente, por su tiempo en la preparación de esta tesis, así también a mis sinodales y amigos Dr. Gerardo Torres Camacho, M.I. Isaac Ruíz Vela y al Dr. José Julián III Montes Rodríguez, quien perseveró, motivó e impulsó hasta la conclusión del tema.





# 1. INTRODUCCIÓN

## 1.1 ANTECEDENTES

El carburizado es un tratamiento superficial de difusión de masa aplicado a piezas, generalmente con geometrías complejas, para generar esfuerzos de compresión en la superficie e incrementar la dureza (consecuencia del posterior tratamiento térmico de temple), mejorar la resistencia al desgaste y la fatiga.

El carburizado se realiza generalmente en aceros con un contenido de carbono desde 0.10 % C a 0.51 % C [1-15], el carbonitrurado en aquellos con contenidos de 0.14 % C a 0.45 % C [16-20] y aceros al carbono eutectoides de 0.80 % C nominal, templados [21,22] y carburizados [23].

El desarrollo de esfuerzos residuales de compresión está inevitablemente acompañado por la distorsión; aunque la distorsión y los esfuerzos residuales han sido ampliamente estudiados, las predicciones para la diversidad de geometrías simples [1-5,21,22] y complejas [6-20,23] permanecen elusivas. Con el incremento de la capacidad computacional y el bajo costo de dichos sistemas, actualmente se hace énfasis sobre el modelado y simulación del proceso de tratamiento térmico de carburizado, temple, revenido y carbonitrurado, para prever y evaluar los productos antes del proceso de manufactura y optimizar el tratamiento termoquímico o térmico y así minimizar los costos de ensayo y error durante la fabricación del producto, por ello para obtener los mejores resultados de simulación cercanos a la realidad dentro de un margen de error mínimo, es necesario partir de modelos detallados basados en leyes físicas que describan la transferencia de masa y los efectos de interacción en el temple entre los campos de temperatura, microestructura y esfuerzos / deformaciones principalmente en estado no estacionario.

### 1.1.1 Modelo de carburizado

La mayoría de las situaciones prácticas de difusión ocurren en estado no estacionario, es decir, el flujo de difusión y el gradiente de concentración en un sólido y en un punto

en particular del mismo, varían con el tiempo. El proceso de carburizado ocurre en varias etapas:

- Calentamiento hasta un rango de temperatura de 850-950 °C, para carburizado gaseoso (industrialmente más utilizado)[2,3,21,22,5-9,23,10,11], 800-1037 °C carburizado al vacío [4,12-15], y 850-950 °C en carburizado en caja [1].
- Homogenización y difusión por 45 minutos (0.75 horas), por ejemplo, para carburizado al vacío, en donde usualmente se emplean temperaturas mayores y tiempos más cortos respecto del carburizado gaseoso [12].
- Temple para inducir la transformación martensítica y conferir dureza.

Un modelo debe representar el flujo en términos de potencial químico, pero para obtener una solución generalizada a la segunda ley de Fick el potencial químico debe ser convertido a concentración. Para desarrollar un modelo y calcular el efecto del carburizado sobre las propiedades del acero se deben considerar algunos supuestos, tales como [16]:

- La dirección de la difusión es perpendicular a la superficie.
- El coeficiente de difusión es independiente de la concentración de carbono.
- La componente de temperatura es constante durante el proceso.

El proceso es gobernado por la siguiente ecuación:

$$\frac{\partial C(x,t)}{\partial t} = D \frac{\partial^2 C(x,t)}{\partial x^2} \quad (1.1)$$

donde  $C$  es la concentración de carbono,  $(x,t)$  representan la posición y tiempo, respectivamente,  $D$  es el coeficiente de difusión de carbono en austenita como función de la temperatura, de acuerdo a una ecuación del tipo de Arrhenius:

$$D = D_0 e^{-\frac{Q}{RT}} \quad (1.2)$$

donde  $Q$  es la energía de activación de la difusión de carbono en austenita, y está en función de los elementos aleantes,  $D_0$  es un factor pre-exponencial,  $R$  es la constante de los gases ideales y  $T$  es la temperatura.

La solución analítica de la Ecuación (1.1) puede obtenerse cuando se especifican condiciones límites físicamente significativas. En la práctica, una solución importante es la de un sólido semi-infinito en la cual se mantiene constante la concentración superficial. Una pieza de un sólido se considera semi-infinita si durante el tiempo que dura la difusión ninguno de los átomos que se difunden llega al extremo de la pieza que está opuesto a aquel a través del cual ocurre la difusión. Frecuentemente, la fuente de la sustancia que difunde es una fase gaseosa, en la cual la presión parcial se mantiene constante, y se hacen las siguientes suposiciones:

- Antes de la difusión, los átomos del soluto (por ejemplo  $C$ ,  $N$ ) están uniformemente distribuidos en el sólido a una concentración inicial  $C_0$ , es decir, cuando  $t = 0$ ,  $C(x, 0) = C_0$  para  $x > 0$ .
- El valor de  $x$  en la superficie es cero y aumenta con la distancia dentro del sólido.
- Se considera que el tiempo en el instante justo antes de que empiece la difusión es igual a cero, para  $t > 0$ ,  $x = 0$   $C(x, t) = C_s$ , en donde  $C_s$  es la concentración de carbono en la superficie.
- El coeficiente de difusión de carbono en austenita es constante.
- La capa de difusión es relativamente delgada en relación a las dimensiones del material, así la concentración de carbono o nitrógeno lejos de la superficie es la concentración inicial de ese elemento en el acero:  $t > 0$ ,  $x = \infty$   $C(x, t) = C_0$ .

Aplicando estas condiciones límite se obtiene la solución:

$$\frac{C-C_s}{C_0-C_s} = \operatorname{erf}\left(\frac{x}{2\sqrt{Dt}}\right) \quad (1.3)$$

y se define una variable  $u$  como:

$$u = \frac{x}{2\sqrt{Dt}} \quad (1.4)$$

donde

$$\operatorname{erf}(u) = \frac{2}{\sqrt{\pi}} \int_0^u e^{-u^2} du \quad (1.5)$$

La función error de Gauss puede ser resuelta gráficamente, y calculando el valor de  $u$  a cierta temperatura, posición y tiempo es posible obtener la concentración de carbono en cualquier punto a partir de:

$$C = C_s + (C_0 - C_s)erf(u) \quad (1.6)$$

Existen tres principales complicaciones en la descripción previa del proceso de carburizado, las cuales deben ser expuestas.

- a) El coeficiente de difusión de carbono en austenita está en función de la concentración; se ha encontrado que la difusividad de carbono disminuye con un incremento en la concentración de carbono, mientras que esta se incrementa en temperaturas de carburizado superiores [5], por lo que los perfiles de carbono calculados considerando la difusión en función de la concentración diferirán de aquellos estimados con la Ecuación (1.3).
- b) En muchos tratamientos de carburizado la temperatura,  $T$ , y la concentración de carbono superficial,  $C_s$ , pueden variar con el tiempo. Después de un periodo inicial de carburización  $C_s$ , y posiblemente  $T$ , son usualmente disminuidos; después de la carburización, normalmente a temperatura y potencial de carbono superior a la etapa de difusión,  $C_s$  puede variar con el tiempo.
- c) Impurezas de elementos tales como Mn, Cr, Si y Ni, entre otros, pueden tener un efecto mayor sobre la difusión del carbono durante el proceso de carburización; si cualquiera de estas impurezas están heterogéneamente distribuidas en la aleación, por ejemplo, segregación en los límites de grano o por oxidación interna o superficial, la difusión de carbono puede ser modificada.

Estas tres principales complicaciones en el proceso de carburizado no pueden ser simuladas por la Ecuación (1.3), es por eso que una solución numérica a dicha ecuación consiste de un grupo de números desde los cuales la distribución de la variable dependiente (masa, temperatura, momento) se puede construir. Con el procedimiento anterior es inconveniente realizarlo si nuestro principal interés es obtener los valores de la variable dependiente en varios puntos.

Así, un método numérico trata como sus incógnitas básicas a los valores de la variable dependiente en un número finito de puntos (llamados nodos) en el dominio de cálculo. El método incluye la tarea de proveer un grupo de ecuaciones algebraicas para estimar estas incógnitas, y elaborar un algoritmo para resolver las ecuaciones.

Uno de los métodos numéricos utilizados para resolver las ecuaciones diferenciales, tales como la ecuación de difusión, son los de diferencias finitas [12,21], dentro de los cuales uno muy utilizado es el método numérico del elemento finito (*FEM*, por sus siglas en inglés) [2-11,13-20,22,23].

Muchos investigadores han medido la difusividad de carbono en la austenita y sugieren ecuaciones empíricas basadas en una Ecuación de tipo exponencial (1.2), considerando, en algunos casos la dependencia con la concentración de carbono, con la temperatura y con el contenido de elementos aleantes. La Tabla 1.1 resume estas ecuaciones empíricas.

**Tabla 1.1** Ecuaciones empíricas para la difusividad de carbono en austenita [5].

$$D(T, C) = (0.47263 - 0.55169C + 0.22848C^2 - 0.02965C^3) \exp\left(-\frac{153593 - 15370C - 10727C^2 + 2432.9C^3}{RT}\right)$$

$$D(T, C) = 0.5 \exp(-30x_c) \exp\left(-\frac{38300 - 1.9 \times 10^5 x_c + 5.5 \times 10^5 x_c^2}{R_c T}\right)$$

$$D(T) = 0.668 \exp\left(-\frac{37460}{R_c T}\right)$$

$$D(T) = 0.49 \exp\left(-\frac{36000}{R_c T}\right)$$

$$D(T, C) = (0.07 + 0.06C) \exp\left(-\frac{32000}{R_c T}\right)$$

$$D(T, C) = (0.04 + 0.08C) \exp\left(-\frac{31350}{R_c T}\right)$$

$$D(T, C) = 0.47 \exp(-1.6C) \exp\left(-\frac{37000 - 6600C}{R_c T}\right)$$

$$D(T) = 0.4718 \exp\left(-\frac{180590}{RT}\right)$$

$$D(T) = 0.0052 \exp\left(-\frac{127950}{RT}\right)$$

$$D(T) = 0.0077 \exp\left(-\frac{107400}{RT}\right)$$

$$D(T) = 0.02 \exp\left(-\frac{112000}{RT}\right)$$

$$D(T, C) = (0.146 - 0.036C(1 - 1.075Cr) - 0.0315Mn + 0.0509Si - 0.0085Ni + 0.3031Mo - 0.052Al) \exp\left(-\frac{144300 - 15000C + 370C^2 - 4366.3Mn + 4050.7Si - 1240.7Ni + 7726Cr + 12126.6Mo - 6788.6Al}{RT}\right)$$

$D$ : difusividad de carbono (cm<sup>2</sup>/s)

$C$ : contenido de carbono (% wt)

$x_c$ : la fracción molar del carbono

$R_c$ : la constante de los gases (1.986 cal/mol/K)

$R$ : la constante de los gases (8.314 J/mol/K)

$T$ : la temperatura (Kelvin)

Ågren [24] reevaluó datos experimentales sobre la difusividad de carbono en austenita para sugerir la siguiente expresión para la difusividad expresada como una función de la variable de composición  $y_c$ :

$$D = 4.53 \times 10^{-7} \left( 1 + y_c(1 - y_c) \frac{8339.9}{T} \right) \exp \left\{ - \left( \frac{1}{T} - 2.221 \times 10^{-4} \right) (17767 - y_c 26436) \right\} \quad m^2 s^{-1} \quad (1.7)$$

donde  $y_c = x_c / (1 - x_c)$ , siendo  $x_c$  la fracción molar del carbono.

En la difusión en sistemas binarios, por ejemplo carbono en hierro gama (austenita), Goldstein y Moren [12] consideran que la difusividad se modifica por elementos tales como Mn, Cr, Si y Ni, los cuales influyen los límites de solubilidad de carbono en austenita, la concentración de carbono superficial y el flujo de masa del carbono, llamando a este sistema como difusión ternaria Fe-C-M, en donde M representa alguno de los elementos mencionados. La difusión de carbono se puede modificar si existe un gradiente de elementos ternarios M en el acero, y uno de los mecanismos por el cual dichos elementos pueden redistribuirse durante la carburización es la oxidación, ya sea interna o superficial, debido a la razón CO/CO<sub>2</sub> en la atmósfera, que puede formar óxidos tales como SiO<sub>2</sub>, Cr<sub>2</sub>O<sub>3</sub> y MnO, aunque bajo las mismas condiciones el Fe y el Ni no se oxidan. La formación de estos óxidos causará una disminución en el elemento metálico M, principalmente en la superficie, provocando que la concentración del elemento M sea cercana a cero; sin embargo, la formación de una capa de óxido sobre la superficie puede complicar el intercambio entre la atmósfera rica en carbono y el sólido.

Una razón o cociente del coeficiente de difusión ternario respecto del coeficiente binario implica la interacción de tres elementos, que puede ser dada por la relación:

$$\frac{D_{12}^3}{D_{11}^3} = \frac{e_{12}x_1}{1 + e_{11}x_1} \quad (1.8)$$

donde el elemento 3 representa al hierro, 1 y 2 son el carbono y el elemento metálico M, respectivamente,  $x_1$  es la fracción molar del elemento 1,  $e_{11}$  y  $e_{12}$  son los parámetros de interacción termodinámicos, los cuales relacionan la actividad del elemento 1 con la fracción molar de los elementos 1 y 2. La Ecuación (1.8) esta en

función principalmente de la concentración del elemento 1, es decir, del carbono, así un gradiente del elemento 2,  $\partial C_2/\partial x$ , solo ocurre cercano a la superficie y, por lo tanto, el efecto de los coeficientes sobre la difusión del carbono solo será considerable cerca de la superficie. Ahora bien, los coeficientes para los formadores de carburos tales como Cr y Mn son negativos, mientras que para Si y Ni son positivos. Las razones de la Ecuación (1.8) para Si y Cr son bastante altas (> al valor absoluto de 0.3) respecto de Ni y Mn, por lo tanto tendrán una mayor influencia sobre la difusión de carbono y sobre el contenido superficial de este, siendo mayor cuando se consideren las interacciones ternarias para el Cr, y menor cuando se consideren las interacciones con el Si.

Para ver el efecto significativo de los coeficientes ternarios al comienzo de los cálculos, por ejemplo, el contenido de cromo en la superficie del acero se considera igual a cero, en donde:

$$D_{12}^3 = D_{CCr}^{Fe} \quad (1.9)$$

Haciendo dicha consideración se aumenta el valor del contenido de carbono superficial desde 1.0 % C (condición de la atmósfera, considerando un sistema binario Fe-C) hasta 1.7 % C a una distancia menor a 12  $\mu\text{m}$  desde la superficie; este efecto de la difusión ternaria (Ecuación (1.9)) considera que ocurre mayor difusión de carbono que en el sistema binario, donde no se consideran interacciones de tres elementos. Se ha reportado que aceros que contienen más de 0.5 % Cr tienen contenidos de carbono superficial mayores a los valores de saturación de la austenita. El valor absoluto de los coeficientes ternarios de Cr y Si es aproximadamente el mismo, sólo que de signo contrario: negativo para el Cr y positivo para el Si, por lo que causan diferentes efectos en la concentración de carbono superficial, y en el caso de Mn y Ni el efecto será muy poco.

Considerando la difusión de nitrógeno y carbono [17-20], la siguiente ecuación está relacionada a la difusión de nitrógeno en el nitrurado [17]:

$$\frac{\partial N}{\partial t} - \frac{\partial}{\partial x_i} \left( D_N \frac{\partial N}{\partial x_i} \right) = 0 \quad (1.10)$$

en donde Ju et al. [18] y Mukai et al. [19] consideran un término adicional



$$\frac{\partial N}{\partial t} - \frac{\partial}{\partial x_i} \left( D_N \frac{\partial N}{\partial x_i} \right) - S = 0 \quad (1.11)$$

con las siguientes condiciones a la frontera

$$-D_N \frac{\partial N}{\partial x_i} n_i = \beta_N (N_s - N_w) \quad (1.12)$$

Aquí,  $N_s$ ,  $N_w$  y  $S$  son, respectivamente, la concentración de nitrógeno en la posición  $x_i$ , el potencial de nitrógeno de la atmósfera (ambos en % de masa) y el término fuente de nitrógeno. La difusividad total  $D_N$  incluye al carbono y nitrógeno, por lo que se asume la regla de las mezclas para su determinación como:

$$D_N = \sum D_{NI}(N) \xi_I \quad (1.13)$$

Cada constituyente  $D_{NI}(N)$  se calcula con base en la siguiente fórmula:

$$D_{NI}(N) = D_{NI,0} f(C, N) h(\text{grad } C, \text{grad } N) \exp\left(-\frac{Q_N}{RT}\right) \quad (1.14)$$

con las funciones de concentración  $f(C, N)$  y gradientes  $h(\text{grad } C, \text{grad } N)$  de carbono y nitrógeno, respectivamente. En la Ecuación (1.14)  $Q_N$  es la energía de activación para la difusión del nitrógeno, y  $D_{NI,0}$  y  $R$  son constantes del material. El coeficiente de velocidad de reacción superficial o coeficiente de transferencia de masa,  $\beta_N$ , en la Ecuación (1.12) del proceso de nitrurado, bajo presión parcial de hidrógeno,  $\rho H_2$ , en la mezcla de gases, está dado por:

$$\beta_N = \beta_0 \rho H_2 \exp\left(-\frac{Q_N}{RT}\right) \quad (1.15)$$

donde  $\beta_0$  es constante. Cuando el coeficiente de velocidad de reacción superficial para el carbono,  $\beta_c$ , se resuelve usando un método experimental, dicho coeficiente se asume constante (0.00025 mm/s) [10], y la difusión de carbono en el acero se puede expresar por las siguientes condiciones a la frontera:

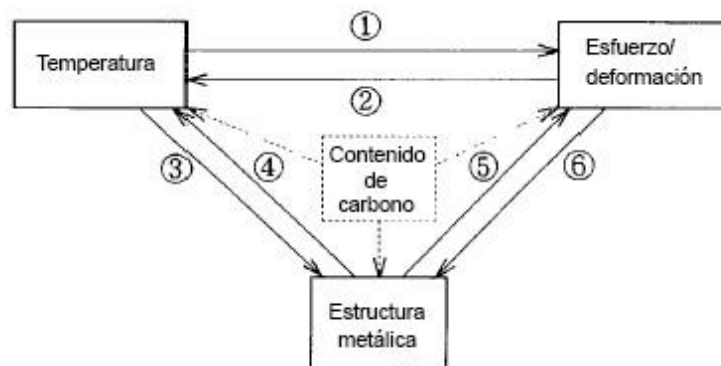
$$-D \frac{\partial C}{\partial x_i} n_i = \beta_c (C_s - C_w) \quad (1.16)$$

siendo esta ecuación similar a la correspondiente para las condiciones a la frontera en el campo de temperatura del modelo de temple.

### 1.1.2 Modelo del temple

El temple de aleaciones metálicas generalmente involucra fenómenos térmicos, metalúrgicos y mecánicos.

En la Figura 1.1 se presenta un esquema que representa el comportamiento metalotermo-mecánico y las interacciones recíprocas entre los tres campos: para 1, el gradiente de temperatura debido al enfriamiento en el temple causa expansión térmica que es restringida por la forma del sólido, generando así esfuerzos / deformaciones térmicos; en 2, parte del trabajo mecánico realizado por los esfuerzos / deformaciones se convierte en calor; en 3, las transformaciones de fase son completamente dependientes de la temperatura, siendo esta el factor principal que determina el tiempo inicial de dicha transformación, ya sea para aquellas que implican difusión, por ejemplo ferrita, perlita o bainita o las sin difusión, como es el caso de la martensita; en 4, la generación de calor latente debido a la transformación de fase afecta la distribución de temperaturas; en 5, la dilatación o cambio de volumen debido a la transformación de fase (cuando esta dilatación volumétrica no es homogénea, es decir, depende de la geometría de la pieza, induce esfuerzos / deformaciones denominados de transformación, siendo comparables a los esfuerzos térmicos); en 6, la transformación de fase inducida por esfuerzos / deformaciones. Por ejemplo, bajo esfuerzos de tensión el tiempo de transformación de la perlita es disminuido y viceversa, y para el caso de la martensita, esta se puede generar en una pieza bajo esfuerzos aplicados a una temperatura superior a la temperatura de inicio de transformación martensítica [6,17].



**Figura 1.1** Ilustración esquemática de las interacciones codependientes entre temperatura, transformación de fases y esfuerzo / deformación [6].

### 1.1.2.1 Campo de temperatura

La ecuación de conducción de calor en estado transitorio, incluyendo una fuente de calor interno para el tratamiento térmico de temple, está dada por la siguiente expresión:

$$\rho c \frac{\partial T}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial x} \left( k_x \frac{\partial T}{\partial x} \right) + \frac{\partial}{\partial y} \left( k_y \frac{\partial T}{\partial y} \right) + \frac{\partial}{\partial z} \left( k_z \frac{\partial T}{\partial z} \right) + S \quad (1.17)$$

donde  $k_x$ ,  $k_y$  y  $k_z$  son las conductividades térmicas del material en las direcciones  $x$ ,  $y$  y  $z$  respectivamente;  $\rho$  es la densidad del material;  $c$  el calor específico del material y  $T$  es la temperatura; las propiedades del material son fuertemente dependientes del contenido de carbono y de la temperatura. Durante el temple, varias fases están presentes en el material, y por esta razón las propiedades varían de acuerdo a la fracción en volumen de cada fase; así, las propiedades del material son calculadas usando la regla de la mezcla lineal como sigue:

$$k = \sum F_i k_i, \quad \rho = \sum F_i \rho_i, \quad c = \sum F_i c_i \quad (1.18)$$

donde  $k_i$ ,  $\rho_i$ ,  $c_i$  y  $F_i$  indican la conductividad térmica, la densidad, el calor específico y la fracción en volumen de la  $i$ -ésima fase, respectivamente.

El término  $S$  de la Ecuación (1.17) es la razón de generación de calor interno debido al calor latente liberado durante las transformaciones de fase; este tipo de generación de calor interno puede ser calculado considerando el calor liberado por unidad de volumen de descomposición de la austenita [9]:

$$S = \Delta H \cdot \frac{\Delta V}{\Delta t} \quad (1.19)$$

o considerando los cambios de entalpía y los cambios de las fracciones de volumen de las diferentes fases:

$$S = \sum_i \Delta H_i \frac{\Delta F_i(T)}{\Delta t} \quad (1.20)$$

donde  $\Delta H_i$  es el calor latente liberado por la fracción de volumen  $\Delta F$  (en función de la temperatura) de la fase  $i$  [22,23,15].

Sin embargo, el campo de temperatura durante el tratamiento térmico no solo es afectado por el calor latente debido al cambio de fase, también por la generación de calor desde el trabajo mecánico debido a esfuerzos / deformaciones, es por eso que la ecuación de conducción de calor debe tener en cuenta dichas consideraciones en el balance de energía total, así como lo muestra la siguiente ecuación.

$$\rho c \frac{\partial T}{\partial t} - \frac{\partial}{\partial x_i} \left( k \frac{\partial T}{\partial x_i} \right) - \sigma_{ij} \dot{\epsilon}_{ij}^p + \sum \rho_i l_i \dot{\xi}_i = 0 \quad (1.21)$$

donde  $\sigma_{ij}$  son los esfuerzos;  $\dot{\epsilon}_{ij}^p$  es la razón de deformación plástica;  $l_i$  es el calor latente producido por la  $i$ -ésima fase progresiva con la fracción de volumen  $\dot{\xi}_i$  al tiempo  $t$  [6,7,10,18,19].

Además de los términos mencionados, cuando se trata de la difusión de carbono y nitrógeno, Liu y cols. [17] consideran un término adicional en la ecuación de temperatura, definiéndolo como la fuente de calor interno,  $r_v$ , de acuerdo a la expresión:

$$\rho c \frac{\partial T}{\partial t} - \frac{\partial}{\partial x_i} \left( k \frac{\partial T}{\partial x_i} \right) - \sigma_{ij} \dot{\epsilon}_{ij}^p - \rho \sum l_i \dot{\xi}_i - r_v = 0 \quad (1.22)$$

donde utilizando coordenadas cilíndricas o polares se ha simulado el tratamiento térmico de temple para un acero eutectoide, en donde la conducción de calor axial es despreciable debido a que los gradientes de temperatura en esa dirección son pequeños, tomando las siguientes consideraciones:

- Temperatura inicial uniforme
- Simetría radial
- Temperatura independiente del desplazamiento angular
- Sección transversal circular uniforme

Bajo estas consideraciones, el flujo de calor dentro de una sección circular es gobernado por la siguiente ecuación:

$$\rho c \frac{\partial T}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial r} \left( k \frac{\partial T}{\partial r} \right) + \frac{k}{r} \frac{\partial T}{\partial r} + S \quad (1.23)$$

aquí  $S$  es la razón volumétrica de generación de calor debido a la transformación de fase de austenita a perlita [21].

Las ecuaciones previas de transferencia de calor se desarrollaron aplicando un balance de energía sobre un elemento diferencial en el interior del dominio de cálculo y siguen siendo las mismas sin importar las condiciones térmicas sobre la superficie. Es decir, las ecuaciones diferenciales no incorporan información relacionada con las condiciones sobre las superficies como la temperatura o flujo de calor, siendo que dichas condiciones en el interior del dominio, están en función de las condiciones en la frontera, ya sea de calentamiento o enfriamiento. Así la Ecuación (1.24) representa la condición de transferencia de calor por convección basada en un balance de energía superficial, en el cual la conducción de calor sobre la superficie en una dirección seleccionada (lado izquierdo de la ecuación) es igual a la transferencia de calor por convección sobre esa superficie y en la misma dirección (lado derecho de la ecuación). El coeficiente de transferencia de calor por convección  $h$  está en función de la temperatura y las características de enfriamiento en cada zona de una pieza templada varían dependiendo de la etapa de temple en función de la temperatura, siendo la primer etapa la formación de una película de vapor que actúa como capa aislante, seguida por la ebullición del medio de temple y por último la transferencia de calor por convección debido al contacto directo entre la superficie de la pieza y el medio de temple [10].

$$-k \frac{\partial T}{\partial x_i} n_i = h(T_s - T_\infty) \quad (1.24)$$

donde  $n_i$ ,  $T_s$  y  $T_\infty$  son la componente del vector unitario normal, la temperatura superficial y la temperatura del medio de temple, respectivamente, para coordenadas  $x$ ,  $y$  y  $z$  [7,9-11,15,17-20,22,23].

Respecto de las coordenadas cilíndricas, tenemos las siguientes condiciones de frontera [21]:

a) En la línea central de un cilindro

$$\text{para } t > 0 \text{ y } r = 0, \quad -k \frac{\partial T}{\partial r} = 0 \quad (1.25)$$

b) En la superficie de un cilindro

$$\text{Para } t > 0 \text{ y } r = s, \quad -k \frac{\partial T}{\partial r} = h(T_s - T_\infty) \quad (1.26)$$

Se observa que en la línea central de un cilindro (Ecuación (1.25)) no hay transferencia de calor debido a los gradientes de temperatura axial despreciables.

Con las ecuaciones anteriores se pretende crear un balance de la energía total que se transfiere como calor, considerando términos adicionales que afectan directamente la temperatura para distintos tipos de coordenadas.

### 1.1.2.2 Campo de microestructura

Además de la temperatura, la existencia de esfuerzos / deformaciones influyen la cinética de transformación de las fases, debido a la acción de los esfuerzos que aceleran la nucleación de la transformación de fase por el mecanismo difusional, y afectan la cinética de transformación por esfuerzos cortantes, como es el caso de la martensita; a este tipo de transformaciones se les conoce como: *transformaciones inducidas por esfuerzos / deformaciones* [5,17].

Las transformaciones de fase durante el proceso de temple se clasifican en dos tipos: por una parte, las del tipo de difusión o isotérmicas, desde la austenita hacia la ferrita, la perlita o la bainita, en donde las transformaciones de fase se describen por ecuaciones de nucleación y crecimiento de cada una de ellas, obteniendo la fracción en volumen de cada fase en cualquier punto en el tiempo y, posteriormente, con dicha fracción se calculan las propiedades térmicas, físicas y mecánicas del material en ese instante. Por otra parte, existe la transformación de fase del tipo sin difusión o atérmica, siendo esencial para la transformación martensítica desde la austenita.

#### 1.1.2.2.1 Transformación con difusión o isotérmica

Para estimar la fracción de fase transformada  $F_i$  (ferrita, perlita o bainita), en la reacción de precipitación difusional durante la descomposición isotérmica de la austenita, se utiliza la ecuación del tipo JMAK (Johnson-Mehl-Avrami-Kolmogorov), la cual

representa el comportamiento cinético típico en la mayoría de las reacciones en estado sólido en dos etapas: nucleación y crecimiento, de acuerdo a la siguiente ecuación:

$$F_i = 1 - \exp(-At^n) \quad (1.27)$$

donde  $t$  es el tiempo total para llevar a cabo la transformación a temperatura constante,  $A$  y  $n$  son parámetros del material obtenidos desde los diagramas de transformación isotérmica ( $TTT$ , por sus siglas en inglés) para un acero en particular [10], no obstante, en la práctica éstos parámetros deben estar en función de la temperatura, por lo tanto, se planteará una nueva condición.

Existen dos métodos para extender la ecuación JMAK bajo condiciones no isotérmicas:

- a) Modificando la Ecuación (1.27) en función de la temperatura, concentración y esfuerzos.
- b) Aplicando la regla de adición basada en la teoría de Scheil.

Para el primer inciso, la fracción de volumen de ferrita, perlita o bainita es expresada como:

$$F_i = 1 - \exp\left\{-\int_0^t f_1(T)f_2(C)f_3(\sigma)(t - \tau)^3 d\tau\right\} \quad (1.28)$$

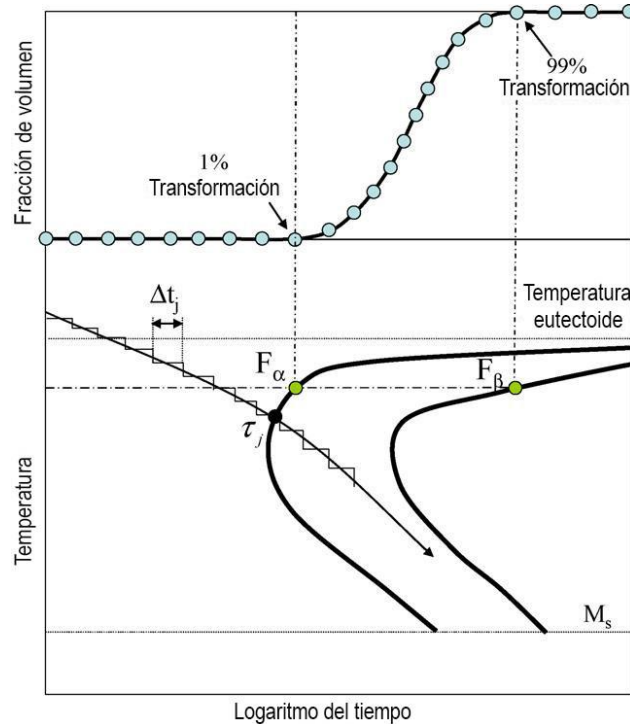
$$f_1(T) = a_0 \left(\frac{T-a_1}{a_2}\right)^{a_3} \left(\frac{a_4-T}{a_5}\right)^{a_6} \quad (1.29)$$

$$f_2(C) = \exp\{-a_7(C - C_0)\} \quad (1.30)$$

$$f_3(\sigma) = \exp\{a_8\sigma_m\} \quad (1.31)$$

donde  $\sigma_m$  es el esfuerzo medio,  $C$  y  $C_0$  son las concentraciones de carbono actual e inicial, respectivamente, y  $a_i$  ( $i = 0, 1, 2, \dots, 8$ ) son parámetros cinéticos de transformación [6,7,18,19]. Cuando se habla de difusión de carbono y nitrógeno, Mukai et al. [19] no consideran el efecto del perfil de nitrógeno en la cinética de transformación perlítica (Ecuación (1.30)), debido a la poca profundidad de penetración de los átomos de nitrógeno y al contenido elevado de carbono en la capa de difusión de este, sin embargo Liu y cols. [17] sí lo consideran.

En el segundo método, el concepto de regla de adición se introdujo por Scheil bajo el supuesto de que la curva de enfriamiento sobre el diagrama TTT puede ser dividida en intervalos de tiempo pequeños,  $\Delta t_j$ , típicamente 0.1 s [21], como se muestra en la Figura 1.2 para un acero eutectoide. En la Figura 1.2,  $F_\alpha$  y  $F_\beta$  son las fracciones de transformación al tiempo inicial ( $\alpha$ ) y al tiempo final ( $\beta$ ) de la reacción, consideradas como 0.01 y 0.99 respectivamente.



**Figura 1.2** División en intervalos de tiempo de la curva de enfriamiento superpuesta sobre el diagrama TTT de un acero eutectoide bajo condiciones isotérmicas [23].

Con este diagrama se puede estimar el periodo de incubación para la transformación con difusión, siendo dicho periodo el tiempo requerido para que empiece la transformación, es decir, cuando se cumpla la siguiente expresión:

$$\sum_{j=1}^m \frac{\Delta t_j}{\tau_j} \geq 1 \tag{1.32}$$

siendo  $\tau_j$  el tiempo en el cual inicia la transformación en el  $j$ -ésimo  $\Delta t$ . El tiempo transcurrido desde el comienzo de la transformación se obtiene de la suma de  $\Delta t_j$ , y el tiempo obtenido basado en la fracción de volumen de la fase en el  $\Delta t$  anterior  $F^{j-1}$  como:



$$t_j = \Delta t_j + \left[ -\frac{\ln\{1-F^{(j-1)}\}}{A} \right]^{1/n} \quad (1.33)$$

donde  $A$  y  $n$  son parámetros del material. Utilizando este tiempo de transformación [22,23], se puede calcular la fracción en volumen de cada fase de acuerdo a la Ecuación (1.27). Los valores de  $A$  y  $n$  son determinados de acuerdo a Kim et al. [15], a partir de diagramas de dilatación obtenidos en los ensayos de enfriamiento continuo usando una técnica aditiva inversa, encontrándose en función de la temperatura, cuando se trata del calentamiento, debido a que la concentración de carbono en cada posición permanece constante, y en función de la composición química, tamaño de grano austenítico y temperatura para el enfriamiento en el temple. Hasta este punto, los modelos presentados se basan en diagramas de temperatura, tiempo y transformación (TTT).

En la subrutina basada en el método del elemento finito que crearon Lee y cols. [5], utilizaron un modelo cinético de transformación difusional para la descomposición de la austenita a partir de diagramas de transformación de enfriamiento continuo (CCT, por sus siglas en inglés). Dicho modelo puede predecir la cinética de transformación difusional para aceros de baja aleación con un amplio rango en composición química, considerando los efectos de elementos aleantes, tamaño de grano austenítico, sobre-enfriamiento por debajo de la temperatura de equilibrio, y las fracciones de volumen transformadas y sin transformar de las fases.

#### 1.1.2.2 Transformación sin difusión o atérmica

La transformación de la fase martensítica desde la austenita es del tipo sin difusión, y debe ocurrir a una velocidad lo suficientemente alta en el tratamiento térmico de temple. La fracción de volumen de martensita transformada,  $F_m$ , puede ser calculada por la ecuación empírica de Koistinen y Marburger [25]:

$$F_m = 1 - \exp[-\alpha_m(M_s - T)] \quad (1.34)$$

donde  $\alpha_m$  es una constante ( $= 0.011 \text{ } ^\circ\text{C}^{-1}$ ) que indica la velocidad de generación de martensita,  $M_s$  es la temperatura de inicio de transformación martensítica, la cual disminuye notablemente con el incremento en el contenido de carbono,  $T$  representa la

temperatura más baja alcanzada durante el temple, y la diferencia de estas temperaturas indica el sobre-enfriamiento por debajo de  $M_s$ .

Es importante destacar un término adicional, en el cual las fracciones de fase transformadas desde austenita por el mecanismo de difusión, llámese ferrita, perlita o bainita, sean consideradas en la Ecuación de la fracción de martensita (1.34), esto se logra multiplicando por el término  $1 - \sum F_i$  donde  $F_i$  representa la fracción de la fase transformada por difusión [22,23].

$$F_m = 1 - \exp[-\alpha_m(M_s - T)](1 - \sum F_i) \quad (1.35)$$

El contenido de carbono debe ser considerado en el cálculo de la temperatura de inicio de transformación martensítica ( $M_s$ ) sobre una pieza carburizada y templada [9], de acuerdo a la ecuación:

$$M_s = 520 - 321C - 50Mn - 30Cr - 20(Ni + Mo) - 5(Cu + Si) \quad (1.36)$$

donde  $C, Mn, Cr, Ni, Mo, Cu, Si$  son los porcentajes en peso de los elementos aleantes (% wt). Lee y Lee [26] investigaron la relación entre la temperatura  $M_s$  determinada desde curvas de dilatación y el número de tamaño de grano austenítico (AGS, por sus siglas en inglés), y encontraron que el tamaño de grano austenítico afecta fuertemente la nucleación y crecimiento de la martensita, debido a que la temperatura  $M_s$  incrementa con la disminución del número de tamaño de grano ASTM, proponiendo la siguiente ecuación en función del tamaño de grano austenítico ( $G$ ).

$$M_s(^{\circ}C) = 402 - 797C + 14.4Mn + 15.3Si - 31.1Ni + 345.6Cr + 434.6Mo + (59.6C + 3.8Ni - 41Cr - 53.8Mo)G \quad (1.37)$$

donde  $C, Mn, Si, Ni, Cr, Mo$  son los porcentajes en peso de los elementos aleantes (% wt). La constante  $\alpha_m = 0.011^{\circ}C^{-1}$  de las Ecuaciones (1.34) y (1.35) fue obtenida por análisis de rayos-X desde datos experimentales graficados en una función exponencial, como el logaritmo del porcentaje en volumen de austenita retenida en función de la diferencia ( $M_s - T$ ) a temperaturas de 24 °C, -24 °C y -79 °C. Este tipo de función normalmente se usa para expresar la cinética de transformación difusional, representada por la Ecuación JMAK (1.27), y debido a la constante  $\alpha_m$  el modelo de

transformación martensítica es algo inflexible. Lee y Van Tyne [27] proponen un modelo cinético para la determinación de la fracción de martensita, el cual considera un comportamiento de transformación sigmoïdal para aceros aleados, donde incluyen dos parámetros en función de la composición química, representados por la ecuación:

$$F_m = 1 - \exp[-K_{LV}(M_s - T)^{n_{LV}}] \quad (1.38)$$

donde:

$$K_{LV}(K^{-1}) = 0.0231 - 0.0105C - 0.0017Ni + 0.0074Cr - 0.0193Mo \quad (1.39)$$

y

$$n_{LV} = 1.4304 - 1.1836C + 0.7527C^2 - 0.0258Ni - 0.0739Cr + 0.3108Mo \quad (1.40)$$

y  $C, Ni, Cr, Mo$  son los porcentajes en peso de los elementos aleantes (% wt), y los coeficientes fueron determinados por el método de Newton-Raphson. El tamaño de grano austenítico no afecta directamente la cinética de transformación martensítica una vez que comienza la transformación, solo afecta a la temperatura  $M_s$ , es decir, al inicio de la transformación, por esta razón no es considerado en la Ecuación (1.38).

Sobre la base de las consideraciones anteriores, la fracción de volumen de martensita,  $F_m$ , es dependiente de la temperatura, como se muestra en la Ecuación (1.34). Sin embargo, una extensión de dicha ecuación propone la dependencia de la temperatura, los esfuerzos y el contenido de carbono bajo consideraciones termodinámicas. Por lo tanto, la nueva ecuación para calcular la fracción de volumen de martensita es:

$$F_m = 1 - \exp\{\psi_1 T + \psi_2(C - C_0) + \psi_{31}\sigma_{ij} + \psi_{32}J_2^{1/2} + \psi_4\} \quad (1.41)$$

Aquí,  $J_2^{1/2}$  es el segundo invariante de esfuerzos cortantes, y  $\psi_1, \psi_2, \psi_3, \psi_4$  son coeficientes obtenidos a partir de experimentos [6,7,10]. Si además se consideran los efectos de las concentraciones de carbono-nitrógeno sobre la cinética de transformación de la martensita durante el temple, se obtiene:

$$F_m = 1 - \exp\{\psi_1 T + \psi_2(C - C_0) + \psi_3(N - N_0) + \psi_4\sigma_m + \psi_5\sigma_e + \psi_6\} \quad (1.42)$$

donde  $N$  y  $N_0$  son las concentraciones de nitrógeno actual e inicial respectivamente,  $\sigma_m$  es el esfuerzo medio,  $\sigma_e$  es el esfuerzo equivalente, y  $\psi_i$  ( $i = 1, 2, \dots, 6$ ) son parámetros del material [17-19]. Es evidente entonces que la microestructura se ve afectada por el campo de temperatura y el campo de esfuerzos / deformaciones.

### 1.1.2.3 Campo de esfuerzos / deformaciones

Las variaciones de temperatura causan esfuerzos térmicos y alteran las propiedades mecánicas, tales como el módulo elástico y la resistencia a la cedencia, entre otras. También, las diferencias en volumen de las fases que coexisten en la transformación causan deformaciones, así como deformación plástica inducida por transformación (*TRIP*, por sus siglas en inglés).

Desde el punto de vista mecánico, el temple es un proceso termoplástico no lineal, en donde la velocidad de deformación total es la suma de las velocidades de deformación: elástica, plástica, térmica y por dilatación estructural debido a la transformación de fase [7,9], tal que:

$$\dot{\varepsilon}_{ij} = \dot{\varepsilon}_{ij}^e + \dot{\varepsilon}_{ij}^p + \dot{\varepsilon}_{ij}^T + \dot{\varepsilon}_{ij}^{tr} \quad (1.43)$$

Aquí, la velocidad de deformación elástica se representa por la ecuación

$$\dot{\varepsilon}_{ij}^e = \frac{1+\nu}{E} \dot{\sigma}_{ij} - \frac{\nu}{E} (\dot{\sigma}_{kk}) \delta_{ij} \quad (1.44)$$

donde,  $E$  y  $\nu$  son el módulo de Young y la razón de Poisson, respectivamente. En la simulación de carburizado y temple,  $(1 + \nu)/E$  y  $\nu/E$  se expresan en función del contenido de carbono ( $C$ ) y la fracción de volumen de la microestructura  $i$ -ésima ( $F_i$ ):

$$\frac{1+\nu}{E} = \sum_{i=1}^n \left[ \frac{F_i}{C_2 - C_1} \left\{ (C_2 - C) \frac{1+\nu_{i1}}{E_{i1}} + (C - C_1) \frac{1+\nu_{i2}}{E_{i2}} \right\} \right] \quad (1.45)$$

$$\frac{\nu}{E} = \sum_{i=1}^n \left[ \frac{F_i}{C_2 - C_1} \left\{ (C_2 - C) \frac{1+\nu_{i1}}{E_{i1}} + (C - C_1) \frac{1+\nu_{i2}}{E_{i2}} \right\} \right] \quad (1.46)$$

La velocidad de deformación plástica se reduce de forma, cuando se emplean parámetros del material dependientes de la temperatura.

$$\dot{\varepsilon}_{ij}^p = \hat{G} \left( \frac{\partial F}{\partial \sigma_{kl}} \dot{\sigma}_{kl} + \frac{\partial F}{\partial T} \dot{T} + \sum \frac{\partial F}{\partial F_{ij}} \dot{F}_{ij} + \frac{\partial F}{\partial C} \dot{C} \right) \frac{\partial F}{\partial \sigma_{ij}} \quad (1.47)$$

$$\frac{1}{\hat{G}} = - \left[ \frac{\partial F}{\partial \varepsilon_{mn}^p} + \frac{\partial F}{\partial k_h} \sigma_{mn} \right] \frac{\partial F}{\partial \sigma_{mn}} \quad (1.48)$$

$$F \equiv f(T, C, \sigma_{ij}, \varepsilon_{ij}^p, F_i, k_h) \quad (1.49)$$

donde,  $F$  es la función de cedencia total como mezcla de fases,  $T$  es la temperatura,  $C$  es el contenido de carbono,  $\sigma_{ij}$  es el esfuerzo de flujo,  $\varepsilon_{ij}^p$  es la deformación plástica,  $F_i$  es la fase individual (austenita, bainita/perlita, martensita), y  $k_h$  es el parámetro de endurecimiento (ya sea isotrópico o endurecimiento cinemático) [10].

La velocidad de deformación térmica está en función del cambio de temperatura,  $\Delta \dot{T}$ , y del coeficiente de expansión térmica instantáneo,  $\alpha_e$ , como sigue:

$$\dot{\varepsilon}_{ij}^T = \alpha_e \Delta \dot{T} \delta_{ij} \quad (1.50)$$

El coeficiente de expansión térmica,  $\alpha_e$ , se expresa como función del contenido de carbono ( $C$ ) y de la fracción de volumen de la microestructura  $i$ -ésima ( $F_i$ ).

$$\alpha_e = \sum_{i=1}^n \left[ \frac{F_i}{C_2 - C_1} \{ (C_2 - C) \alpha_{i1} + (C - C_1) \alpha_{i2} \} \right] \quad (1.51)$$

La velocidad de deformación por transformación de fase está dada por:

$$\dot{\varepsilon}_{ij}^{tr} = \beta^T \cdot dV \quad (1.52)$$

donde

$$\beta^T = \beta^0 + (\alpha_M - \alpha_A) T \quad (1.53)$$

En las dos ecuaciones anteriores,  $\beta^T$  y  $\beta^0$  son el coeficiente de expansión volumétrica para la transformación martensítica a cierta temperatura  $T$  y a  $0^\circ C$ ,  $\alpha_M$  y  $\alpha_A$  son los coeficientes de expansión térmica de la martensita y austenita, respectivamente, y  $V$  es el volumen de la transformación martensítica [9]. Sin embargo, la Ecuación (1.52) sólo considera la transformación de fase de austenita a martensita. Una ecuación más general debe considerar las distintas fases en el temple, por ejemplo:

$$\varepsilon_{ij}^{tr} = \sum_{i=1}^n \beta_{ij} \dot{F}_{ij} \delta_{ij} \quad (1.54)$$

Aquí,  $\beta_{ij}$  es la dilatación debido al cambio de microestructura desde la fase  $i$  a la fase  $j$   $\dot{F}_{ij}$  es el cambio fraccional de volumen respecto del tiempo de la transformación de fase  $i$  a  $j$  [6,7,10,17-19].

La deformación plástica inducida por transformación (TRIP) es un fenómeno de deformación plástica acelerada causado por un nivel bajo de esfuerzos aplicados durante la transformación de fase, debido al cambio de volumen y a las diferentes propiedades mecánicas de las fases coexistentes durante la transformación. La interacción entre diferentes fases mientras dicha transformación está en progreso causa la deformación plástica inducida por transformación, la cual es un *fenómeno de deformación plástica acelerada causada por un nivel bajo de esfuerzos aplicados durante la transformación de fases* [10], y es determinada por:

$$\varepsilon_{ij}^{tp} = \frac{3}{2} \sum_{i=1}^n K_{ij} h(F_{ij}) \dot{F}_{ij} S_{ij}, \quad h(F_{ij}) = 2(1 - F_{ij}) \quad (1.55)$$

Aquí,  $K_{ij}$  es el coeficiente de transformación por deformación plástica para transformación con y sin difusión, llámese bainita y martensita, respectivamente, el cual se puede determinar por resultados experimentales basados en diagramas de dilatación-temperatura,  $h(F_{ij})$  es la contribución desde el progreso de la transformación hacia la deformación plástica de transformación,  $\dot{F}_{ij}$  es la razón de transformación de fase y  $S_{ij}$  es el esfuerzo cortante [6,7,10,17].

Cuando el efecto *creep* (fluencia o termofluencia) es significativo como, por ejemplo, en el caso del *tempering* (revenido), Inoue y Arimoto [6] consideran la velocidad de deformación por creep  $\dot{\varepsilon}_{ij}^c$ :

$$\dot{\varepsilon}_{ij}^c = \frac{3}{2} \frac{\dot{\varepsilon}^c}{\sigma_e} S_{ij} \quad (1.56)$$

donde  $\dot{\varepsilon}^c$ ,  $\sigma_e$ , y  $S_{ij}$  son la velocidad de deformación por creep equivalente, el esfuerzo equivalente y el esfuerzo desviatorio, respectivamente. Sin embargo, Sugianto y cols.

[10] no lo consideran durante el carburizado y temple de un engrane helicoidal, argumentando que no hay una carga externa, excepto el propio peso de la pieza.

Un nuevo término se puede considerar cuando se trata de la difusión de carbono y nitrógeno. Cuando el carbono o nitrógeno se difunden como átomos intersticiales, cambian los parámetros de red para inducir la dilatación volumétrica. Algunos investigadores han propuesto fórmulas de los parámetros de red en función del contenido de carbono y nitrógeno. Si la transformación  $\alpha \rightarrow \beta$  ocurre en el intervalo de tiempo entre  $t_0$  y  $t$ , debido a la difusión de ambos elementos intersticiales la velocidad de deformación por difusión será:

$$\dot{\epsilon}_{ij}^{df} = \frac{1}{3} \left( \frac{\frac{V_{\beta}^T(C,N)}{n_{\beta,Fe}}}{\frac{V_{\alpha}^T(C_0,N_0)}{n_{\alpha,Fe}}} - 1 \right) \dot{F}_{\alpha \rightarrow \beta} \delta_{ij} \quad (1.57)$$

donde  $n_{\alpha,Fe}$  y  $n_{\beta,Fe}$  son el número de átomos de  $Fe$  en una celda unidad para cierta microestructura,  $V_{\alpha}^T$  y  $V_{\beta}^T$  representan el volumen de red antes y después de la transformación, respectivamente,  $C$  y  $N$  son los contenidos de carbono y nitrógeno al tiempo  $t$ , respectivamente. Si no ocurre transformación durante la difusión de carbono y nitrógeno, la microestructura solamente será austenita. Así, la velocidad de deformación por difusión simplemente dependerá de la velocidad de difusión de carbono y nitrógeno, y del parámetro de red de la austenita, el cual está en función de la concentración al tiempo  $t$  de carbono y nitrógeno [17-19].

### 1.1.3 Simulación de carburizado y temple: análisis de la literatura

#### 1.1.3.1 Difusión de carbono

Goldstein y Moren [12] desarrollaron dos modelos matemáticos basados en el método numérico de diferencias finitas, para simular el proceso de carburizado. El primero de sus modelos aplica para aceros de baja aleación, en donde se consideran las variaciones de temperatura, tiempo, contenido de carbono superficial y coeficiente de difusión durante el proceso. En el segundo modelo, ellos simularon el efecto de los elementos aleantes tales como Mn, Cr, Ni y Si durante la carburización. Los perfiles de carbono calculados para aceros de baja aleación fueron comparados con resultados

experimentales disponibles en la literatura, obteniéndose una buena concordancia entre ambos, incluso en la superficie.

Uno de sus modelos es aplicado a un acero 4815, el cual es carburizado en un horno continuo a 921 °C por 22 horas, con 1.25 %C en la entrada del horno y, posteriormente, un tiempo de difusión de 13 horas a 910 °C, variando el potencial de carbono a 0.8 % y 0.6 % en el centro y salida del horno, respectivamente, y considerando la difusividad en función de la concentración. Después de la etapa de carburizado, observaron un perfil poco usual, causado por la disminución del potencial de carbono y de la temperatura en la superficie, promoviendo que el carbono se difunda hacia afuera de la pieza (decarburización), formando una protuberancia en la gráfica en las cercanías de la superficie, donde se tiene que  $\partial C/\partial X = 0$ , y más allá de esta posición el carbono continúa difundándose hacia el interior de la pieza. En otra simulación, en un tratamiento de carburizado por 3 horas, con un potencial de carbono de aproximadamente 1.3 %C, con la subsecuente disminución lineal de este por dos horas hasta 1.0 %C, mientras se mantiene constante la temperatura no se aprecia de forma considerable la decarburización, debido a que la concentración de carbono superficial disminuye (de 1.3 %C a 1.0 %C) solo ligeramente más rápido que el proceso de difusión, y puede mantener la forma normal de la curva de carburización, concluyendo que la variación del contenido de carbono superficial durante la etapa de difusión causa la decarburización cercana a la superficie, y previene cualquier incremento significativo en la profundidad de capa.

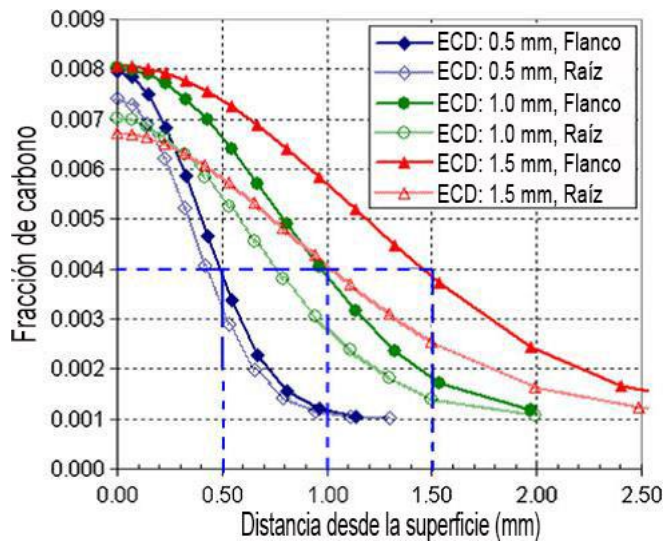
Los mismos autores simularon un proceso de carburizado al vacío. En esta simulación la temperatura se mantuvo constante en 1037 °C por 45 minutos, que es el tiempo total del proceso (30 y 15 minutos de carburizado y difusión, respectivamente). Para los 30 minutos de carburización, la concentración de carbono superficial se mantuvo constante en aproximadamente el valor de saturación de carbono en austenita (1.67 %C), y para la etapa de difusión un flujo de cero fue impuesto sobre la superficie como condición de frontera, es decir,  $\partial C/\partial X = 0$ ; el perfil en la difusión muestra como el gradiente de carbono en el proceso se distribuye, sin pérdida de carbono desde la pieza hacia el exterior, y la profundidad de capa incrementa, mientras la concentración de carbono superficial disminuye, siendo los factores más críticos para esto: la



concentración de carbono superficial inicial, y el tiempo total de difusión, donde en  $X = 0$  no hay flujo de masa.

Por su parte, Li y cols. [14] estudiaron la influencia de la geometría de un engrane sobre la distribución de carbono, habiendo sido carburizado al vacío con acetileno como fuente de carbono. En su estudio examinaron el efecto de tres profundidades de capa (0.5, 1.0 y 1.5 mm) sobre los esfuerzos residuales, definiendo la profundidad de capa como la distancia desde la superficie hacia una profundidad que tiene un contenido de carbono de 0.4 %. Usaron el paquete computacional de elemento finito DANTE-VCARB con la finalidad de encontrar los tiempos de tratamiento de carburizado y difusión para obtener una concentración de carbono superficial de 0.8 %, así como las profundidades de capa mencionadas.

La Figura 1.3 muestra la distribución de carbono predicha para profundidades de capa efectiva (*ECD*, por sus siglas en inglés) de 0.5, 1.0 y 1.5 mm en dos secciones de un solo diente en el engrane, sobre el flanco (geometría convexa) y la raíz (geometría cóncava). Para una profundidad de capa de 1.5 mm el contenido de carbono en la raíz es de 0.68 %, el cual es menor al 0.8 % del flanco, lo cual se debe a que el flanco tiene una forma convexa tendiendo a ser plana, mientras que la raíz tiene una curvatura geoméricamente significativa, que provoca dispersión radial localizada de la difusión de carbono, reduciendo así el contenido de carbono local, lo cual se traduce en una temperatura de inicio de transformación martensítica superior respecto del flanco; así, dicha diferencia en el contenido de carbono incrementa con la profundidad de capa e influencia el endurecimiento en el temple y la respuesta de los esfuerzos residuales. Para las tres profundidades de capa, las diferencias en el contenido de carbono “local” entre el flanco y la raíz son de 0.06, 0.10 y 0.12 % para una profundidad de capa de 0.5, 1.0 y 1.5 mm, respectivamente. Por lo tanto, se debe considerar la geometría en el proceso de carburizado para garantizar el contenido de carbono sobre la superficie.



**Figura 1.3** Distribución de carbono en función de la profundidad desde la superficie, y efecto de la geometría en la profundidad de capa [14].

De manera semejante, Jung y cols. [4] simularon y validaron experimentalmente el perfil de concentración de carbono en un cilindro con un contenido inicial de carbono de 0.16 %, obtenido usando el paquete computacional comercial de elemento finito ABAQUS, el cilindro fue carburizado al vacío a 1000 °C en una atmósfera de acetileno. Ellos calcularon dos veces el perfil de concentración de carbono, con y sin considerar el efecto de los elementos aleantes en la ecuación de difusividad de carbono, y validaron sus resultados experimentalmente. Particularmente, el perfil de concentración de carbono considerando el efecto de los elementos aleantes es el más cercano al perfil experimental, lo cual indica que los elementos aleantes en el acero afectan la difusividad y, en consecuencia, el perfil de concentración de carbono. Para el cálculo, utilizaron varios pasos consecutivos de carburizado y difusión, alternando las condiciones de frontera. Por un lado, para los pasos de carburizado, en los cuales el acetileno es suministrado al horno, la concentración de carbono sobre la superficie es considerada como la máxima solubilidad de carbono en austenita a esa temperatura. Por otro lado, durante el tiempo de difusión en el cual el acetileno no es suministrado hacia el horno, el flujo de carbono sobre la superficie es considerado como cero.

Rangaswamy y cols. [2] compararon su simulación numérica con datos experimentales de combustión, dureza por microindentación y difracción de rayos-X. Para éste último, un análisis Rietveld fue llevado a cabo para determinar los parámetros de red de los

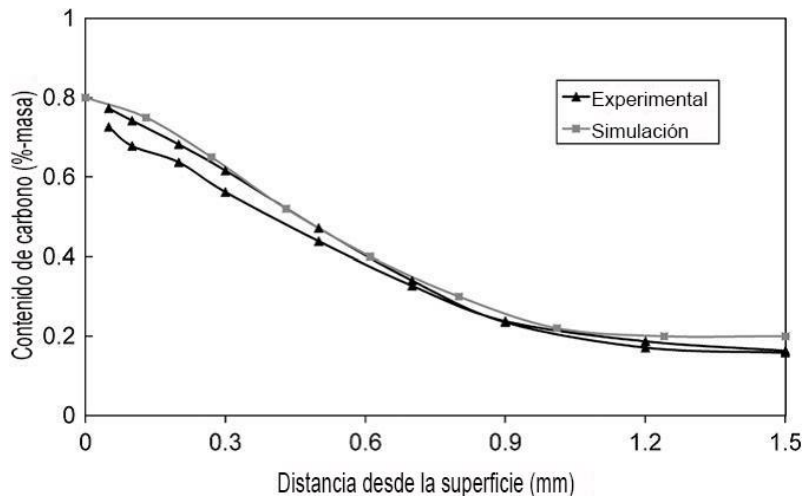
constituyentes en una profundidad secuencial, relacionando así el contenido de carbono con la razón de los parámetros de red  $c/a$ , para la cual elaboraron una curva de calibración de materiales con concentraciones de carbono nominal de 0.2, 0.4, 0.6 y 0.8 %C, y midieron el perfil de carbono de un disco de acero 5120. Por debajo de 350  $\mu\text{m}$  obtuvieron buenos resultados al comparar sus cálculos con los obtenidos por las técnicas de rayos-X y combustión, siendo ésta última la de mejor concordancia con la simulación. Sin embargo, la variación de carbono desde la superficie hasta 350  $\mu\text{m}$  fue muy significativa, encontrando una meseta en el perfil de 50 a 150  $\mu\text{m}$  de profundidad de 0.76 %C para combustión, y un máximo de 0.67 %C a una profundidad de 100  $\mu\text{m}$  en rayos-X. Concluyen que la mayor variación entre el modelo y los resultados experimentales se encuentra cercana a la superficie, la cual podría estar asociada, como lo refieren, con la decarburización (esto está soportado cualitativamente con los datos de dureza por microindentación). De la misma manera, Kim y cols. [15] encontraron experimentalmente una meseta cerca de la superficie en los datos graficados del perfil de carbono, medidos con un espectrómetro de descarga luminiscente (*GDS*, por sus siglas en inglés), debido a la capa de carbono-óxido formada en la superficie.

Jung y cols. [4] usaron un análisis cuantitativo para construir la curva de concentración de carbono en función de la distancia desde la superficie, utilizando una micro-sonda electrónica (*EPMA*, por sus siglas en inglés) para obtener los resultados descritos anteriormente. Sugianto y cols. [10] analizaron el diente de un engrane helicoidal para obtener la distribución de carbono a lo largo de una línea perpendicular, situada a 1.8 mm desde la superficie del diente, obteniendo valores experimentales menores respecto de los que predijo su modelo de elemento finito. Sin embargo, ambos resultados están cualitativamente de acuerdo, considerando el intervalo de incertidumbre en la medición experimental.

Acht y cols. [3] simularon un disco de 15 y 30 mm de espesor de un acero SAE 5120, con un diámetro exterior de 120 mm y un diámetro interior de 40 mm. Todas sus simulaciones fueron hechas con el paquete computacional comercial SYSWELD, manteniendo constante el coeficiente de difusión de  $2.4 \times 10^{-7} \text{cm}^2/\text{s}$  a la temperatura de carburizado de 940 °C y un tiempo de difusión de 120 y 300 minutos. Para validar

su simulación utilizaron una técnica cuantitativa para medir la concentración de carbono denominada espectroscopia de emisión óptica (*OES*, por sus siglas en inglés), con el objetivo de detectar los principales factores de influencia (contenido de carbono superficial, profundidad de carburizado y espesor) y su interacción sobre la distorsión en el proceso de carburizado, a través de un diseño de experimentos establecido y analizado (gráfica de probabilidad y análisis de varianza) basado en la repetición de varios ensayos y la dispersión de sus resultados. Debido a que la simulación de elemento finito no produce resultados dispersos, esto es; si se ejecuta la misma simulación dos veces, se obtendrá el mismo resultado, por ésta razón se consideran otros métodos para analizar los resultados basados en un diseño de experimentos.

Como se puede observar en la Figura 1.4, el perfil de carbono simulado tiene buena concordancia con el perfil de carbono medido experimentalmente. La dispersión de los contenidos de carbono superficial y de la profundidad de carburizado se basa en perfiles de carbono medidos.



**Figura 1.4** Comparación de perfil de carbono medido y simulado (valores promedio con dispersión formando una banda) [3].

Para este estudio se encontró, por la gráfica de probabilidad y análisis de varianza, que la profundidad de carburizado es significativamente dependiente de los cambios de espesor de pared y diámetro interior de las piezas carburizadas. Adicionalmente, el análisis de varianza detectó como significativa la interacción entre los factores profundidad de carburizado y espesor; esta interacción no fue detectada por la gráfica

de probabilidad, por lo que una posible razón es que es menos sensible que el análisis de varianza y que es solo capaz de detectar factores de influencia altamente significativos.

### **1.1.3.2 Distribución de temperatura**

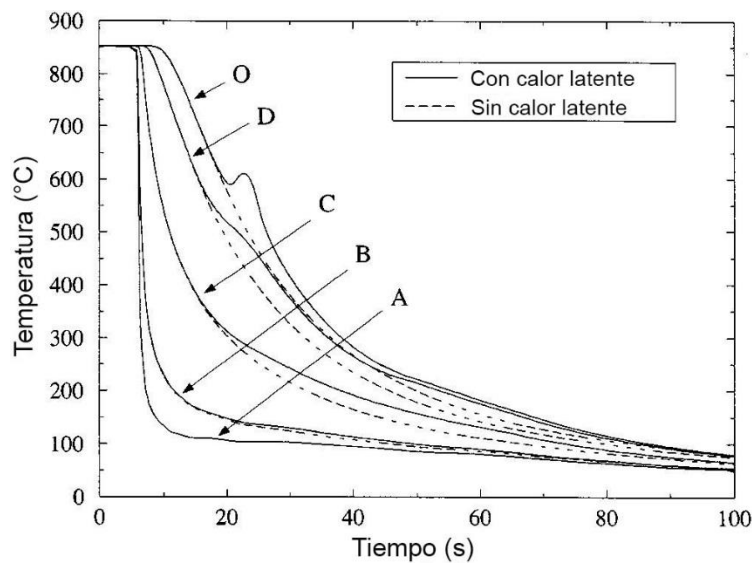
Durante el temple, las transformaciones de fase están en función de la temperatura y velocidades de enfriamiento. Graficando la temperatura en función del tiempo transcurrido en el temple, podremos conocer la velocidad de enfriamiento, siendo esta la tangente de la curva. Durante los primeros 3 s de temple, la velocidad de enfriamiento sobre la superficie es mayor que en ciertos puntos hacia el centro de la pieza; después de este tiempo cambia inversamente, sin dejar de lado que la temperatura en la superficie es siempre inferior a aquella en los puntos internos durante todo el tratamiento [5,13]. Ferguson y cols. [8] simularon la temperatura en función del tiempo a diferentes profundidades durante el temple en aceite en el paquete computacional comercial de elemento finito DANTE en la muesca de una probeta tipo charpy carburizada a 900 °C por 4 horas con un potencial de carbono de 0.8 % encontrando una diferencia entre superficie y núcleo menor a 30 °C a 2.7 mm de profundidad. Por su parte Li y cols. [14] consideraron en su simulación la diferencia de temperatura como función de la geometría de un engrane, obteniendo como resultado, primero que la temperatura en el flanco es notablemente menor que la temperatura en la raíz, debido a la convexidad y concavidad, respectivamente, y segundo, que existe diferencia en velocidades de enfriamiento entre dichos puntos, por ejemplo al inicio del tratamiento térmico del temple, la velocidad de enfriamiento en el flanco es mayor respecto de la raíz y a medida que progresa el enfriamiento, la velocidad de enfriamiento en la raíz sube gradualmente e incluso excede a la velocidad de enfriamiento en el flanco.

Además, como ya se mencionó anteriormente, cuando ocurre una transformación de fase hay un cambio de entalpía asociado, siendo una medida del calor latente liberado o absorbido durante la transformación, que afecta directamente a la temperatura, de ahí la importancia de incluir éste término en el modelado para predecir el historial de temperatura y microestructura. Woodard y cols. [22] simularon el temple de un cilindro de acero 1080 (eutectoide) con y sin considerar el efecto del calor latente. En la

simulación, el cilindro de 38 mm de diámetro fue templado desde una temperatura inicial uniforme de 850 °C, en un baño de agua con agitación a 22.5 °C. La Figura 1.5 muestra el historial de temperatura en 5 puntos, distribuidos desde el centro del cilindro (O) hasta el radio o superficie (A); de la figura es evidente que el calor latente tiene un efecto medible sobre el historial de temperatura en varios puntos dentro del cilindro en el temple. Por ejemplo, la consideración en la Ecuación de temperatura (1.17) del término  $S$  (calor latente), causa un pequeño pico local en la gráfica, especialmente en los puntos cercanos al eje del cilindro (O, D).

$$\frac{\partial}{\partial x} \left( k_x \frac{\partial T}{\partial x} \right) + \frac{\partial}{\partial y} \left( k_y \frac{\partial T}{\partial y} \right) + \frac{\partial}{\partial z} \left( k_z \frac{\partial T}{\partial z} \right) + S = \rho c \frac{\partial T}{\partial t}$$

Tales picos no se aprecian en el historial de temperatura calculado, cuando se desprecia el calor latente (curva punteada en la Figura 1.5).



**Figura 1.5** Historiales de temperatura para un cilindro de acero 1080 de 38 mm de diámetro templado en agua, mostrando el efecto del calor latente [22].

La consideración del calor latente tiene un efecto sobre los cálculos de microestructura mayor que sobre la distribución de temperatura del temple, lo cual se debe a la diferencia, aparentemente pequeña, entre las curvas de enfriamiento para un mismo punto, como se muestra en la Figura 1.5. Es decir, un punto en el cilindro será expuesto a cierta temperatura por una cantidad de tiempo significativa, siendo este

tiempo crítico para la evolución de la transformación perlítica, como es evidente en la Ecuación (1.27), principalmente en la mitad de la transformación.

$$F_i = 1 - \exp(-At^n)$$

Kang e Im [23] utilizaron los resultados de la Figura 1.5 para validar su simulación por elemento finito del historial de temperatura en un cilindro de 19.1 mm de diámetro con un contenido de carbono inicial de 0.20 %, y carburizado con un potencial de carbono de 0.75 %C bajo las mismas condiciones de temple. Ellos obtuvieron que el historial de temperatura del acero carburizado fue similar al del acero eutectoide en la superficie, debido a que la mayor parte de la fase de austenita fue transformada hacia martensita para ambos aceros. Sin embargo, en el centro del cilindro carburizado no se observó un pico local, como el que se muestra en la Figura 1.5 (punto “O”), como consecuencia de que la transformación de austenita a ferrita genera poca cantidad de calor latente (58.6 J/m<sup>3</sup> a 700 °C) en comparación con el acero eutectoide en el cual la transformación ocurre de austenita a perlita, liberando mayor cantidad de calor latente (651.3 J/m<sup>3</sup> a 700 °C). De acuerdo con estos resultados, concluyeron que el calor latente liberado durante la transformación de fase tiene un efecto significativo sobre la evolución de la microestructura. Por su parte, Kim y cols. [15] refieren un rango de 600 a 800 °C para la transformación de fase ferrita/perlita a una velocidad de enfriamiento relativamente lenta de 1-2 °C/s.

### 1.1.3.3 Microestructura

Lee y cols. [5] desarrollaron una subrutina de elemento finito para simular el tratamiento de carburizado y distorsión térmica con cinética de transformación (*CTDT*, por sus siglas en inglés) de un acero AISI 5120 y validaron sus resultados con el paquete computacional comercial DANTE y resultados experimentales de la literatura bajo las mismas condiciones. Para la simulación seleccionaron desde la literatura las cinco temperaturas de inicio de transformación al equilibrio ( $A_{e3}$ ,  $A_{e1}$ ,  $B_s$ ,  $M_s$  y  $A_{cm}$ ) para la formación de austenita desde una microestructura inicial y la descomposición de ésta hacia ferrita, cementita o martensita. En este caso,  $A_{e3}$  es la temperatura para determinar el comienzo de la formación de ferrita desde austenita durante el enfriamiento.  $A_{e1}$  es la temperatura de inicio para la formación de la austenita durante

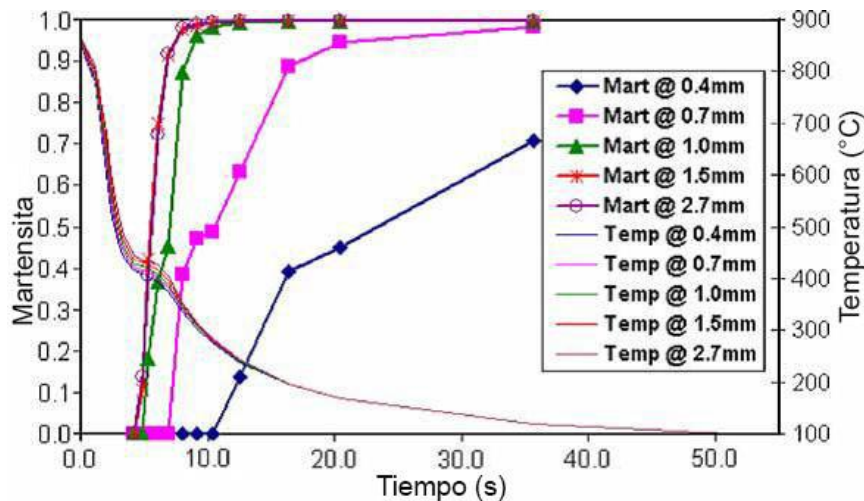
el calentamiento y perlita durante el enfriamiento, mientras  $B_s$ , y  $M_s$  indican la temperatura de inicio de transformación bainítica y martensítica, respectivamente. La temperatura  $A_{cm}$  se emplea para calcular la fracción en volumen al equilibrio de la ferrita proeutectoide, entre las temperaturas  $A_{e3}$  y  $B_s$  durante el enfriamiento, las cuales están en función de la composición del acero. En la predicción de la microestructura después del temple en cuatro diferentes puntos de una muestra cilíndrica debido a las diferentes concentraciones de carbono y modelos cinéticos usados para cada simulación, la predicción de las fracciones de fase difiere entre las dos simulaciones. La fracción en volumen de austenita retenida predicha por DANTE (aproximadamente 25 %) fue más del doble de aquel valor obtenido por CTDT (10 %), además de presentar diferente contenido en los puntos de la superficie, lo que indica una distribución no uniforme en la concentración de carbono superficial, en comparación con CTDT en donde se obtuvieron valores similares de las fracciones en volumen de austenita retenida en los puntos de la superficie, lo cual indica una concentración de carbono uniforme superficial. Solo DANTE predijo la formación de ferrita y perlita en el interior de la muestra, y en este mismo punto, en cuanto a la fracción de bainita se refiere, ambos modelos predijeron una cantidad similar. Las diferencias en resultados entre las dos simulaciones son debidas a que se utilizaron diferentes modelos cinéticos de transformación y propiedades termo-mecánicas para cada subrutina. La fracción en volumen de austenita retenida puede variar dependiendo de la técnica o método para la cuantificación experimental. Rangaswamy y cols. [2] reportaron de 25 % a 30 % en volumen de austenita retenida a una profundidad de 100  $\mu\text{m}$  en un disco de acero AISI 5120, medido por la técnica de difracción de rayos-X convencional, de comparación en intensidades de la austenita (220) y refinamiento Rietveld, en donde el contenido de carbono debe ser al menos 0.85 % en la etapa de carburización a 900 °C. Por su parte, Song y cols. [9] simularon los tratamientos de carburizado a 910 °C con un potencial de carbono de 1.0 % en un horno continuo y temple en aceite con base en un modelo matemático de elemento finito, aplicado en un diente de un engrane con forma de anillo. Los resultados de la simulación de la fracción en volumen de austenita retenida fueron validados con mediciones experimentales por la técnica de difracción de rayos-X, obteniendo un contenido de 20 % cercano a la superficie.



Para investigar el efecto de la concentración de carbono sobre la cinética de transformación de fase, Kim y cols. [15] simularon por elemento finito los tratamientos de carburizado al vacío en un horno continuo y temple bajo dos diagramas esquemáticos. En el primero (caso 1), la etapa de carburizado y difusión se llevó a cabo a 930 °C por 70 y 160 minutos, respectivamente, con un enfriamiento hasta 830 °C y un tiempo de permanencia a esta temperatura de 20 minutos con un potencial de carbono para carburizado y difusión, de 1.0 y 0.8 % respectivamente. Para el segundo (caso 2), solo se modificaron las temperaturas por 800 °C para carburizado y difusión, con un enfriamiento hasta 750 °C. Ellos utilizaron dos aceros con casi la misma cantidad de elementos aleantes, excepto el contenido de carbono (0.22 y 0.51 %), a diferentes velocidades de enfriamiento. Para el acero con 0.22 %C la formación de bainita ocurrió por debajo de 600 °C, a una velocidad de enfriamiento mayor de 20 °C/s, mientras que la transformación martensítica empezó por debajo de 400 °C. Para el acero con 0.51 %C se retrasó significativamente la transformación de ferrita a una velocidad de enfriamiento relativamente lenta, de 1 °C/s, y disminuyó la temperatura de inicio de transformación martensítica por debajo de 300 °C, además de presentar mayor fracción de martensita a la misma velocidad de enfriamiento de 10 °C debido al mayor contenido de carbono respecto del acero con 0.22 %. En el caso 1 del acero con bajo contenido de carbono, obtuvieron la mayor fracción de martensita en la superficie y poca ferrita en el núcleo en comparación con el caso 2, en donde la fracción de ferrita incrementó significativamente en el núcleo debido a la baja velocidad de enfriamiento, bajo contenido en carbono y a la ferrita pre-existente formada a la temperatura de permanencia de 750 °C en donde coexiste la ferrita y austenita en una región con un porcentaje de carbono inferior de 0.5 %. Para validar los resultados de la simulación, las fracciones de fase fueron cuantificadas en un analizador de imágenes y por microscopio electrónico de barrido (*SEM*, por sus siglas en inglés) obteniendo buena concordancia entre los resultados predichos y los experimentales.

Asimismo, la fracción de volumen de austenita retenida y la temperatura de inicio de transformación martensítica están en función del porcentaje de carbono; para un mayor contenido de carbono en la capa carburizada,  $M_s$  disminuye significativamente (Ecuación (1.36) y (1.37)). Por lo tanto, la transformación martensítica ocurre inicialmente en la posición por debajo de la capa carburizada, incluso aunque la

temperatura en la superficie sea menor que en el interior, y después progresa hacia la superficie, con una cantidad mayor de austenita retenida después del temple en ésta zona. En la Figura 1.6 se muestran los resultados de la simulación de Ferguson y cols. [8] de la transformación de fase martensítica a diferentes profundidades respecto de la superficie; se observa que a 0.4 mm aparece la martensita después de 10 s, y sólo se obtiene el 40 % después de 20 s. A una profundidad de 0.7 mm la transformación empieza cerca de los 7 s, obteniendo 95 % a los 20 s, así en la superficie solo se obtiene un máximo de 70 % de martensita, siendo el 30 % de austenita retenida.



**Figura 1.6** Historial de la formación martensítica a diferentes profundidades durante el temple [8].

Debido a que la martensita no alcanzó a transformar en su totalidad, porque la temperatura del final de transformación,  $M_f$  se encuentra por debajo de la temperatura del medio de temple, y con el objetivo de obtener la mayor resistencia en el material sobre la superficie, lo cual, requiere de un mínimo de austenita retenida, ellos simularon el tratamiento criogénico en nitrógeno líquido para continuar con la transformación martensítica, obteniendo una predicción de austenita retenida superficial de 7 %. Análogamente Li y cols. [14] obtuvieron en su simulación un contenido de austenita retenida por debajo del 3 %.

La forma de la martensita también está en función del contenido de carbono, obteniendo en la superficie una martensita acicular, y una martensita en forma de listón en el núcleo, en donde el contenido de carbono es menor [9]. En consecuencia, los valores de dureza de un espécimen templado dependen de la morfología y fracción de

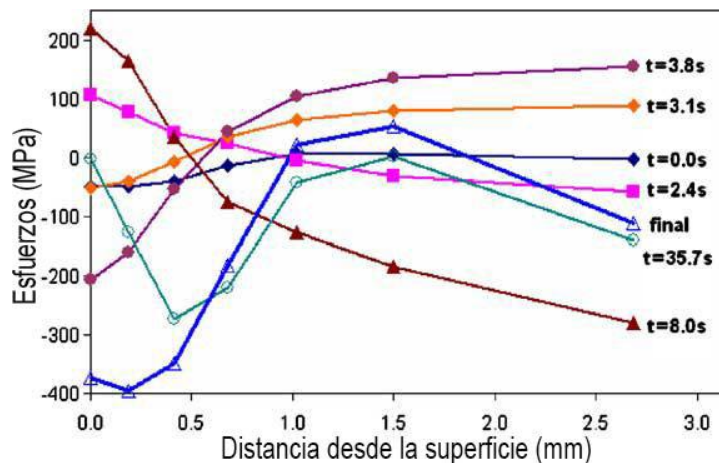
la microestructura. Así, los valores de dureza disminuyen desde la superficie hacia el interior, independientemente de si la pieza es carburizada o carbonitrurada. Para éste último tratamiento, el alto contenido de carbono y nitrógeno en la superficie, además de retrasar la descomposición de austenita hacia una fase relativamente suave como la perlita, como ya se mencionó, retarda la descomposición de austenita hacia martensita a menores temperaturas, y por esta razón, la martensita empezará a transformar a temperaturas inferiores a las de una pieza sólo carburizada. De acuerdo a la simulación del comportamiento metalo-termo-mecánico en carburizado y carbonitrurado de Liu y cols. [17], la martensita formada en un rango de temperaturas inferiores es más dura que aquella formada a temperaturas superiores. Así, la fracción menor de martensita sobre la superficie, después del temple en una pieza carbonitrurada, tendrá el mismo efecto de endurecimiento sobre una pieza sólo carburizada, a pesar de que ésta última tiene menor porcentaje de austenita retenida.

#### **1.1.3.4 Esfuerzos / deformaciones**

La distribución de esfuerzos residuales en dirección axial, radial o tangencial, son medidos experimentalmente por difracción de rayos-X [2,7-9,17], los cuales, al comienzo del temple, son de compresión por debajo de la capa carburizada, y de tensión cerca de la superficie; con el progreso del tratamiento térmico el estado de esfuerzos entre la superficie y el núcleo cambia inversamente. Los esfuerzos de compresión son generados en la superficie y los esfuerzos de tensión en el centro, debido a la transformación martensítica, la cual genera esfuerzos de compresión durante el temple, siendo la superficie el último lugar donde ocurre dicha transformación [9].

Durante el temple, los gradientes térmicos, las transformaciones de fase y la geometría de la pieza tratada contribuyen a la evolución de los esfuerzos. En la Figura 1.7 se muestran los resultados de la simulación para esfuerzos internos de Ferguson y cols. [8] en diferentes tiempos en el temple sobre 7 puntos seleccionados (0.0, 0.2, 0.4, 0.7, 1.0, 1.5, 2.5 mm) desde la superficie hacia el interior de una muestra carburizada. Al principio ( $t = 0$  s), los esfuerzos internos son bajos, pero no cero, y son originados por la transferencia de la pieza a través del aire desde el horno al tanque de temple. En 2.4 s se generan esfuerzos de tensión en la superficie debido a la alta velocidad de

enfriamiento superficial, generando deformación plástica bajo tensión, debido a que la austenita tiene bajo esfuerzo de cedencia [13]. En 3.1 s la temperatura del núcleo es alta y la velocidad de enfriamiento excede a la velocidad de enfriamiento de la superficie con menor temperatura, la cual causa contracción térmica en el núcleo. A medida que el tiempo avanza desde 2.4 s a 3.8 s los esfuerzos en el núcleo llegan a ser de tensión, mientras que en la superficie son de compresión, debido, estrictamente hablando a los cambios de temperatura, porque todavía no empieza la transformación de fase. Entre 3.8 y 8.0 s la simulación predice un gran cambio en la distribución de esfuerzos internos, debido a la formación de martensita. En 8.0 s está casi completa la transformación martensítica en el núcleo, mientras que en la superficie todavía no ha comenzado (esto se aprecia en la Figura 1.6). En 35.7 s, la formación de la martensita en la capa carburizada ha comenzado, para este tiempo el esfuerzo máximo predicho ocurre a una profundidad de 0.4 mm, siendo de aproximadamente 300 MPa. Al final, el máximo esfuerzo de compresión superficial es de -380 MPa, con una profundidad en el cambio de esfuerzos compresión-tensión de 1.0 mm; este mismo valor fue obtenido experimentalmente por Rangaswamy y cols. [2], a una profundidad de cambio de esfuerzos compresión-tensión de 1.2 mm.



**Figura 1.7** Simulación de la evolución de esfuerzos durante el temple [8].

Con el tratamiento criogénico para la reducción de austenita retenida en la capa superficial con alto contenido de carbono y la expansión de volumen asociada debido a la formación de martensita adicional se generan esfuerzos de compresión adicionales hasta por 50 MPa. Para validar estos resultados, midieron los esfuerzos residuales por

difracción de rayos-X, después del tratamiento criogénico y revenido, encontrando que los esfuerzos residuales de compresión experimentales son ligeramente menores que los predichos por la simulación con una diferencia total menor al 15 % entre ambos resultados.

Para ejemplificar la influencia de la geometría sobre los esfuerzos residuales mínimos principales, para tres profundidades de capa, Li y cols. [14] encontraron en su simulación que a mayor profundidad de capa, mayor será la profundidad de los esfuerzos residuales de compresión. Sin embargo, la magnitud de éstos sobre la superficie disminuye no-linealmente con la profundidad de capa. Por lo tanto, en la selección de la profundidad de capa se debe considerar el costo y las condiciones bajo carga que experimentará la pieza en servicio.

También obtuvieron una diferencia significativa en la magnitud de los esfuerzos de compresión entre el flanco y la raíz del diente, alcanzando un valor arriba de 1000 MPa para esta última zona, debido a que los gradientes térmicos y transformación de fase contribuyen a la concentración de esfuerzos locales durante el temple. La expansión de volumen ocurre originalmente en el centro del diente, generando 300 MPa de esfuerzos de compresión debido a la transformación martensítica, y para balancear estos esfuerzos el flanco responde con 200 MPa en tensión; interesantemente, la expansión en volumen del diente crea un efecto de doblez en la raíz, colocando esta región bajo compresión, siendo este el factor clave para la diferencia significativa de esfuerzos de compresión entre ambas zonas.

Por su parte, Liu y cols. [17] encontraron que los valores de esfuerzos después del carburizado-temple son siempre mayores que aquellos después del carbonitrurado-temple, independientemente de la posición, debido a la diferencia en la fracción de volumen transformada, causada por los diferentes contenidos de carbono y nitrógeno en este dominio. Es decir, una mayor fracción de volumen de descomposición de austenita a martensita (carburizado) significa mayor expansión en la transformación, y como consecuencia los esfuerzos serán mayores.

### 1.1.3.5 Dureza

Hay varios métodos para predecir la distribución de dureza en un acero templado, por ejemplo, el método con base en la regla de las mezclas lineales, en donde se determina la dureza de cada fase por separado en función del contenido de carbono, contenido de elementos aleantes, velocidad y tiempo de enfriamiento. Kim y cols. [15] utilizaron las siguientes ecuaciones para predecir la dureza en su simulación:

$$HV_f = 42 + 223C_f + 53Si + 30Mn + 12.6Ni + 7Cr + 19Mo \quad (1.58)$$

$$+(10 - 19Si + 4Ni + 8Cr + 130V) \log v_c$$

$$HV_b = -323 + 185C_b + 330Si + 153Mn + 65Ni + 144Cr + 191Mo \quad (1.59)$$

$$+(89 + 53C_b - 55Si - 22Mn - 10Ni - 20Cr - 33Mo) \log v_c$$

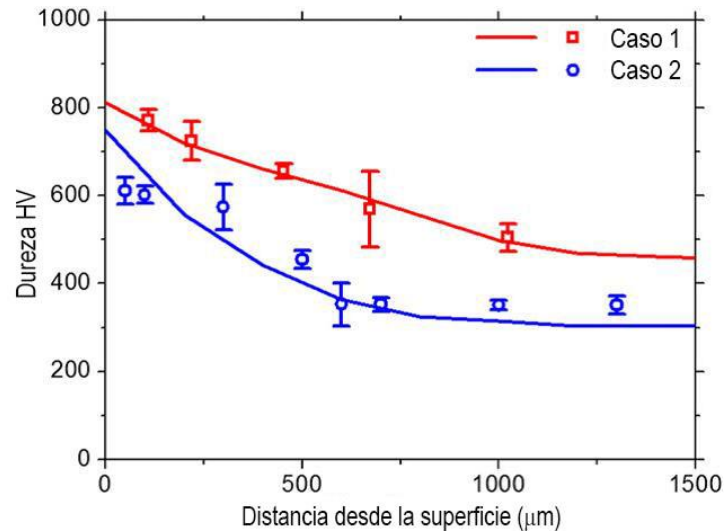
donde  $HV_f$  y  $HV_b$  son las durezas de la ferrita y la bainita, respectivamente,  $C_f$  y  $C_b$  son el contenido de carbono de la ferrita y la bainita respectivamente,  $Si, Mn, Ni, Cr, Mo$  son los porcentajes en peso de los elementos aleantes (% wt), y  $v_c$  es la velocidad de enfriamiento a 700 °C. Para la determinación de la dureza en la martensita utilizaron la siguiente ecuación:

$$HV_m = 3.03 \times 10^{-7} \cdot T_t (37.9 + \ln t_t)^2 - 0.0289 \cdot T_t (37.9 + \ln t_t) \quad (1.60)$$

$$+ \left[ 874.9 - 202.2 \cdot \left( \frac{0.22}{C_m} \right)^2 \right]$$

donde  $T_t$  y  $t_t$  son la temperatura y tiempo de revenido, respectivamente, y  $C_m$  es el contenido de carbono de la martensita. Finalmente, con estas ecuaciones calcularon los perfiles de dureza y los compararon con datos experimentales. La Figura 1.8 muestra los perfiles de dureza Vickers experimentales y calculados en función de la profundidad, en donde se observa la tendencia general de la dureza, que disminuye desde la superficie hacia el interior de la pieza, debido al gradiente de carbono y los efectos de la morfología microestructural. Para el caso 1 (temperatura de 930 °C para

carburizado y difusión) y para el caso 2 (temperatura de 800 °C para carburizado y difusión) los resultados calculados concuerdan aceptablemente con los datos experimentales. También se observa en el perfil de dureza una meseta cerca de la superficie para el caso 2, misma que se observó en el perfil de carbono para esta pieza.



**Figura 1.8** Comparación entre los perfiles de dureza calculados (líneas continuas) y experimentales (símbolos) después del tratamiento térmico de carburizado para el caso 1 (rojo) y caso 2 (azul) [15].

Para el caso 1 la dureza experimental tiene un valor máximo de 780 en escala Vickers (HV, por sus siglas en inglés) cerca de la superficie, que es precisamente donde hay mayor contenido de carbono; este mismo valor fue obtenido experimentalmente por Cavaliere y cols. [16] en un acero AISI 5115 para un tratamiento a 930 °C por 3 horas de difusión.

Por su parte, Sugianto y cols. [10] mencionan que uno de los factores más importantes para predecir la distribución de dureza en un acero templado son los datos de entrada referentes al enfriamiento, debido a que es relevante para la transformación de fase desde austenita hacia perlita o bainita. Por esta razón, ellos utilizaron el ensayo Jominy para la predicción de dureza, en donde cada punto de la probeta estandarizada para conocer la templabilidad del acero, tiene una característica del tiempo de enfriamiento de 800 a 500 °C. Ellos calcularon la dureza Rockwell en función de la distancia Jominy ( $JD$ ), contenido de carbono ( $C$ ) y tiempo de enfriamiento Jominy ( $JCT$ ), de acuerdo a la siguiente expresión:

$$HRC \equiv f(JD, C, JCT) \quad (1.61)$$

El cálculo lo hicieron para un engrane helicoidal, el cual tiene una sección redonda de 24 mm de diámetro por 35 mm de longitud y una sección helicoidal de 17.7 mm de diámetro por 44.5 mm de longitud, en el cual se midió la dureza en dos secciones transversales: a 20 mm (sección redonda) y a 64 mm (sección helicoidal), obteniendo buena concordancia entre el perfil de dureza predicho y el medido experimentalmente por microindentación Vickers, además de obtener una profundidad de capa (punto donde existe una dureza de 550 HV (52.3 HRC)) de 1.0 a 2.0 mm desde el diámetro exterior.

La dureza superficial en la punta del diente de la sección transversal helicoidal (círculo del addendum) es mayor que en el círculo de la raíz (dedendum), debido a que durante el carburizado gaseoso hay mayor absorción de carbono en el círculo del addendum que en la raíz. La razón para esto es la convergencia de la atmósfera carburizante sobre esta zona, mientras que en el área de la raíz hay divergencia y, por lo tanto, como ya se mencionó anteriormente, habrá menor contenido de carbono y en consecuencia menor dureza.

También observaron que el espesor de la profundidad de capa no es paralelo en todo el perfil del diente, siendo mayor en la punta del diente y menor en la raíz. Sin embargo, no consideraron este fenómeno en su simulación [10].

#### **1.1.4 Paquetes computacionales comerciales**

Existen varios paquetes computacionales comerciales utilizados como herramienta para la predicción del comportamiento metalográfico, térmico y mecánico en el tratamiento de carburizado y temple por el método de elemento finito, tales como: TRAST [2], SYSWELD [3], HEARTS [6], DEFORM-HT [10], DANTE [8,11-14] y COSMAP [7,20].

Rangaswamy y cols. [2] simularon el carburizado y temple con el paquete computacional TRAST, el cual es una subrutina que se ejecuta en ABAQUS, para calcular esfuerzos residuales, predecir y describir la evolución de las transformaciones de fase en el material, con soluciones de las ecuaciones de transporte por el método



numérico de elemento finito para el historial másico, térmico y mecánico de un acero carburizado. La simulación la realizaron en tres pasos: 1) predicción de la distribución de carbono usando el modelo de difusión de masa en ABAQUS, 2) incorporando los resultados del primer paso en el modelo térmico-metalúrgico ABAQUS/TRAST determinaron el perfil de temperatura y las fases constituyentes y, 3) incorporando los resultados del primero y segundo paso en el modelo mecánico ABAQUS/TRAST calcularon los esfuerzos.

De manera similar, Acht y cols. [3] simularon el proceso de carburizado en tres pasos en el paquete comercial SYSWELD. En el primer paso, simularon el proceso de difusión de carbono, empleando para ello la ecuación de la segunda ley de Fick con un coeficiente de difusión constante. En el segundo paso calcularon la distribución de temperatura con la transformación de fase, en donde para incluir el perfil de carbono en los cálculos térmicos implementaron el contenido de carbono como una variable auxiliar. Para el tercer paso utilizaron un modelo mecánico para la distribución de esfuerzos-deformaciones. Los cálculos mecánicos consideran la temperatura y el historial de transformación de fase, además de los esfuerzos creados durante el proceso de difusión sin dependencia del carbono, con parámetros de entrada tales como: Módulo de Young, razón de Poisson y curvas esfuerzo-deformación.

Con base en el marco de referencia de las propiedades metalo-termo-mecánicas, Inoue y Arimoto [6] desarrollaron un sistema de ingeniería asistido por computadora (CAE, por sus siglas en inglés) denominado HEARTS (HEAt tReaTment Simulation system) para simular la distribución de carbono, evolución de fases, temperatura y esfuerzos-deformaciones en el tratamiento térmico de carburizado, temple y revenido para dos y tres dimensiones. El sistema HEARTS fue diseñado e implementado con base en la técnica de elemento finito, con el objetivo de desarrollar un programa para usos prácticos, los cuales pueden analizar sistemas en dos y tres dimensiones y trabajar con diferentes tipos de elementos y funciones sin dificultad, además de ser validado con simulaciones de tratamientos térmicos para algunos problemas prácticos y comparando los resultados con datos experimentales.

Otro paquete que incluye la herramienta de ingeniería asistida por computadora es el denominado DEFORM-HT (Design Environment for FORMing-Heat Treatment).

Sugianto y cols. [10] modelaron el tratamiento de carburizado y temple en un engrane helicoidal, incorporando la cinética de transformación de fase durante el calentamiento, carburizado, difusión y tratamiento de temple. Además, determinaron el coeficiente de difusión por convección, con un método de modificación iterativo incluido en este paquete, desde curvas de enfriamiento calculadas; dicho paquete también cuenta con una base de datos referentes a la distancia Jominy en función del contenido de carbono para la predicción de dureza.

DANTE es una sub-rutina diseñada con base en el método numérico de elemento finito, que se ejecuta a través de ABAQUS. Es útil para predecir el estado de los esfuerzos residuales en un material después de que este se ha sometido a un tratamiento térmico, la evolución y la fracción final de volumen de las fases metalúrgicas, la dureza y la distorsión. DANTE cuenta con utilerías que permiten al usuario mejorar o personalizar el material y las bases de datos de proceso. Las utilerías del paquete incluyen: herramientas para optimizar los programas de carburización, ajuste de parámetros cinéticos a partir de datos de dilatometría, cálculo de los coeficientes de transferencia de calor a partir de datos tiempo-temperatura, entre otras.

Existe otro paquete computacional de simulación denominado COSMAP (COmputer Simulation of MAterial Process), el cual se desarrolló con base en la teoría de las propiedades metalo-térmicas-mecánicas, considerando las ecuaciones acopladas de difusión, conducción de calor, esfuerzos inelásticos y cinética de la transformación de fase en el carburizado y carbonitrurado. La precisión de cálculo de COSMAP fue verificada por comparación con datos experimentales de temperatura, distorsión y esfuerzos residuales. Para hacerlo, los autores también han trabajado en acumular una base de datos de propiedades termofísicas y mecánicas, así como parámetros de transferencia de calor de algunos tipos de medios de temple en materiales de referencia [7,20].

## **1.2 DEFINICIÓN DEL PROBLEMA**

En la industria, el ajuste de las variables de los tratamientos térmicos de carburizado y temple se sigue haciendo, mayormente, de manera empírica, mediante ensayo y error,

teniendo como consecuencia costos e inversiones de tiempo importantes, los cuales, extrapolados a grandes volúmenes de producción, resultan muy significativos.

Los paquetes computacionales de simulación son costosos, lo cual hace que, en ocasiones, sean inaccesibles en su adquisición por las industrias que realizan tratamientos térmicos.

### **1.3 JUSTIFICACIÓN**

Ante las prácticas industriales actuales, en las cuales el ajuste de las variables del tratamiento térmico de carburizado y temple se sigue haciendo mediante ensayo y error, con los consiguientes costos e inversiones de tiempo que resultan de dicha estrategia, y dado que los paquetes computacionales de simulación son costosos, se hace necesario el desarrollar una aplicación computacional de bajo costo, estando así al alcance de una buena cantidad de empresas, que permita simular de manera confiable el proceso en cuestión, para poder realizar ajustes sin la necesidad de realizar una cantidad extensa de pruebas.

### **1.4 OBJETIVOS**

#### **1.4.1 General**

Desarrollar un modelo que describa los fenómenos de transferencia de masa y de calor que ocurren durante el tratamiento térmico de carburizado y temple de una pieza de acero de baja aleación, implementado en una aplicación computacional con su correspondiente validación experimental.

#### **1.4.2 Específicos**

- Representar el fenómeno térmico del tratamiento de carburizado y temple de una pieza de acero de baja aleación, por medio de las ecuaciones matemáticas que rigen la transferencia de calor.
- Representar el fenómeno de flujo másico que ocurre durante el tratamiento térmico, a través de las ecuaciones matemáticas que describen la transferencia de masa.

- Discretizar las ecuaciones involucradas en el fenómeno, para su resolución, mediante el método numérico de volumen finito, para un dominio no ortogonal.
- Implementar las ecuaciones algebraicas obtenidas de la discretización, en el lenguaje de programación FORTRAN, para generar así un código que contenga al modelo desarrollado.
- Validar por comparación con mediciones experimentales los resultados obtenidos del modelo.

## **1.5 HIPÓTESIS**

Es posible encontrar condiciones de operación mejoradas para el tratamiento térmico de carburizado y temple, que permitan cumplir con especificaciones requeridas, mediante el uso de un modelo matemático que represente apropiadamente los fenómenos que ocurren durante dicho proceso.

## 2. MARCO TEÓRICO

### 2.1 CARBURIZADO

Es un proceso termoquímico, en el cual el carbono atómico se difunde intersticialmente desde la superficie al interior de una pieza de acero (de bajo carbono) a la temperatura de austenización, seguido por los tratamientos térmicos de temple para formar una microestructura martensítica y comúnmente un revenido. El gradiente del contenido de carbono obtenido en la fase austenítica y la transformación de fase en el temple causan un gradiente de dureza, produciendo una capa superficial que, además de conferir resistencia al desgaste al material [28], genera resistencia a la propagación de las grietas debido a los esfuerzos de compresión en la superficie, es decir resistencia a la fatiga [29].

#### 2.1.1 Carburizado sólido

Implica el empaquetamiento de las piezas a carburizar (separadas  $\approx 50$  mm) en una caja resistente a las temperaturas de carburizado (875-925 °C), y sellada herméticamente con arcilla refractaria. La caja se calienta lentamente hasta la temperatura de carburizado y se mantiene por un tiempo definido que está en función de la profundidad de capa requerida.

Junto con la pieza a carburizar se introduce un medio rico en carbono (coque), que reacciona con el oxígeno del aire en el interior, formando monóxido de carbono ( $CO$ ) de acuerdo a:



Liberando átomos de carbono que difundirán intersticialmente desde la superficie de la pieza, según:



En la práctica, la velocidad de carburización se puede acelerar agregando un “energizador”, usualmente 10-15 % de carbonato de bario ( $BaCO_3$ ), el cual se disocia a la temperatura de carburizado, de acuerdo a:



El dióxido de carbono ( $CO_2$ ) así producido reacciona con el coque para formar nuevamente monóxido de carbono.



Así, la proporción de monóxido de carbono incrementa debido al oxígeno de la caja y a la descomposición del carbonato de bario y, por lo tanto, la velocidad de carburización.

### 2.1.2 Carburizado líquido

Se lleva a cabo en una mezcla de sales que contiene: 20-50 % de cianuro de sodio ( $NaCN$ ), hasta 40 % de carbonato de sodio ( $Na_2CO_3$ ), y el resto cantidades de cloruro de sodio ( $NaCl$ ) o bario ( $BaCl_2$ ).

La mezcla rica en cianuro se funde a temperatura de 870-950 °C, y las piezas se ponen en racks que se sumergen por periodos que varían desde cinco minutos a una hora, dependiendo de la profundidad de capa requerida. El proceso es útil para piezas pequeñas con capas carburizadas poco profundas de 0.10-0.25 mm, y es económico debido a la rápida velocidad de calentamiento por la alta capacidad calorífica del baño líquido, acelerando la transferencia de calor hacia las piezas.

El  $NaCN$  se oxida en la superficie del baño líquido:



El cianato de sodio ( $NaCNO$ ) así formado se difunde hacia el baño y se descompone en la superficie del acero:



El reactivo ( $2CO$ ) se descompone según la reacción (2.2) y los átomos de carbono y nitrógeno se difunden intersticialmente en el acero, además de que el nitrógeno incrementa la dureza debido a la formación de nitruros.

El problema con éste proceso es que los cianuros son extremadamente venenosos, y se debe tener precaución con los vapores, además del confinamiento de los residuos [30].

### 2.1.3 Carburizado gaseoso

En la forma primitiva de éste proceso termoquímico, la atmósfera es tan rica en carbono que, en función de la temperatura, se alcanza el límite de solubilidad de dicho elemento en la austenita sobre la superficie de la pieza, promoviendo la formación de carburos y *hollín* (“soot” en inglés), depositándose éste último en el horno y en las piezas a tratar, es por ello que en la actualidad en algunas plantas de carburizado se controla el contenido de carbono de la atmósfera.

Las atmósferas para carburizado están compuestas de un gas de enriquecimiento, el cual es la fuente principal de carbono (por ejemplo metano,  $CH_4$ ) y un gas portador o gas endotérmico (Endogas) contenido en la cámara y en el vestíbulo del horno, cuya función es acelerar la reacción de carburizado en la superficie de la pieza, el cual es una mezcla de: monóxido de carbono ( $CO$ ), hidrógeno ( $H_2$ ) y nitrógeno ( $N_2$ ) con pequeñas cantidades de dióxido de carbono ( $CO_2$ ), vapor de agua ( $H_2O$ ) y metano ( $CH_4$ ). El Endogas es producido por la reacción del gas natural (principalmente metano) y aire en un horno de retorta o tubo de reacción con catalizador de níquel, por separado (generador de Endogas), y transportado hacia el horno.

La calidad de un gas endotérmico se puede determinar por:

- El punto de rocío ( $H_2O$ )
- La composición química

El punto de rocío es independiente de la temperatura de la atmósfera, es decir, si se alimenta un gas endotérmico a cierto punto de rocío a tres hornos sellados a diferentes temperaturas de atmósfera, un aparato manual de medición del punto de rocío en la atmósfera de los tres hornos corroborará el mismo valor, tanto en los hornos como a la salida del generador, sin embargo el potencial de carbono diferirá en los tres hornos, dependiendo de la temperatura, debido a la relación tripartita de punto de rocío – temperatura del horno – potencial de carbono.

Este tipo de carburizado es el más utilizado industrialmente.

#### **2.1.4 Equipo para carburizado gaseoso**

Los hornos para carburizado gaseoso varían ampliamente en su construcción física, y se dividen en dos categorías principales: *por lote* (“batch” en inglés) y continuos; la diferencia entre estos es la movilidad de las piezas durante el tratamiento a través del horno.

##### **2.1.4.1 Hornos tipo batch**

Los hornos más comunes son los tipo *pozo* (“pit” en inglés) y los tipo horizontal. Los hornos “pit” son colocados en un pozo con la cubierta justo por arriba del nivel del piso, y son cargados y descargados con la ayuda de un polipasto; se usan principalmente para piezas de gran volumen que requieren de tiempos largos de tratamiento, con el subsecuente temple, que implica el viaje de la pieza a través del aire hasta el baño, provocando la oxidación superficial que, dependiendo de la aplicación, será removida por granallado o decapado ácido.

A diferencia de estos hornos, el de tipo horizontal no presenta oxidación en la carga, debido a que las piezas que salen del horno pasan directamente a través de un vestíbulo con atmósfera protectora hacia el tanque de temple. Este tipo de hornos son capaces de tratar termoquímicamente diferentes tipos de lotes con amplia variedad de profundidades de capa.

##### **2.1.4.2 Hornos continuos**

Este tipo de hornos para carburizado incluyen banda transportadora para llevar las piezas desde la entrada a la salida del horno durante el tratamiento. Muchos de estos hornos pueden ser construidos con el tanque de temple hermético, de manera que se producen piezas libres de oxidación.

#### **2.1.5 Variables del proceso de carburizado**

La operación exitosa del proceso de carburizado está en función del control de tres variables principales:

- Temperatura
- Tiempo
- Composición de la atmósfera



Otras variables que afectan la transferencia de carbono hacia las piezas incluyen: el grado de circulación de la atmósfera carburizante y el contenido de aleantes de las piezas.

### **2.1.5.1 Temperatura**

La máxima velocidad a la cual el carbono puede difundir sobre las piezas está limitada por la difusión de carbono en la austenita que, a su vez, está en función de la temperatura, 925 °C (1700 °F) es la más comúnmente utilizada para carburizado, debido a que permite una velocidad relativamente rápida, sin deteriorar el equipo del horno, principalmente el herramental diseñado para la geometría específica de las piezas. Sin embargo se podría disminuir el tiempo de carburizado aumentando la temperatura a 955 °C (1750°F) o 980 °C (1800 °F) sobre piezas que requieren mayor profundidad de capa.

Para obtener resultados consistentes en el carburizado, la temperatura debe estar uniformemente distribuida en la carga de trabajo, aunque al inicio del proceso se pueden encontrar gradientes de temperatura en la etapa de calentamiento.

Debido a que las piezas en el exterior de la carga alcanzan primero la temperatura del horno, y por lo tanto empezarán a carburizar antes que las piezas que se encuentran en el interior de la carga, se promoverá la variabilidad en la profundidad de capa, primero entre las piezas de un mismo lote y, segundo, en una pieza en particular, además el hollín se depositará sobre las piezas relativamente frías expuestas a la atmósfera carburizante, por lo que, para obtener mejores resultados, la carga de trabajo se debe calentar hacia la temperatura de carburizado en la cercanía de una atmósfera neutral; en hornos tipo batch las piezas pueden ser calentadas en Endogas hasta que alcancen la temperatura del horno, y después el carburizado empezará en paralelo con la adición del gas de enriquecimiento. En el caso de los hornos continuos, se construyen con una cámara de precalentamiento separada para asegurar la uniformidad de la temperatura antes de la zona del carburizado.

Ahora bien, para el caso de la colocación de los termopares usados para el control de la temperatura, en hornos tipo batch son usualmente colocados de manera que alcancen el set-point de temperatura antes que la carga, y en el caso de los hornos continuos en

donde las zonas no están definidamente separadas, el termopar de la primera zona (calentamiento) se coloca cerca del final de dicha zona, para prevenir el sobrecalentamiento de la carga, en el centro de la zona de carburizado y si la última zona está a una temperatura inferior a la de carburizado, se colocará al final de la descarga; sin embargo, las características individuales, tales como la localización de los tubos radiantes se debe considerar.

### 2.1.5.2 Tiempo

Cuando el contenido de carbono es controlado en la superficie, de tal manera que sea inferior al límite de saturación de carbono en la austenita, se obtendrán profundidades de capa menores a las obtenidas en dicho límite. Cómo ya se mencionó la profundidad de capa está en función de la temperatura y el tiempo, es decir, al aumentar la temperatura disminuye el tiempo de carburizado para una misma profundidad de capa, y para el caso en que las piezas o la carga sean de gran volumen también será necesario aumentar el tiempo de carburizado.

Para piezas que serán templadas directamente del horno, el ciclo podría ampliarse el tiempo suficiente para permitir que las piezas alcancen una temperatura de aproximadamente 843 °C (1550 °F), desde la temperatura de carburizado antes del temple.

### 2.1.6 Composición de la atmósfera

Los principales constituyentes de la atmósfera son: gases reductores ( $CO$ ,  $H_2$  y  $CH_4$ ), gases oxidantes ( $CO_2$ ,  $H_2O$ , y  $O_2$ ), y  $N_2$  que es un gas inerte que actúa sólo como un diluyente.

Las cantidades de  $CO$ ,  $CO_2$ ,  $H_2$ , y  $H_2O$  están muy cerca de las proporciones esperadas en el equilibrio desde la reacción reversible:



El metano ( $CH_4$ ) está presente en cantidades en exceso de aquella cantidad que se esperaría si todos los constituyentes gaseosos estuvieran en equilibrio.

Aunque la secuencia de reacciones involucradas en el carburizado no es conocida en detalle, se sabe que el carbono puede ser difundido o removido rápidamente desde el acero por la reacción reversible global:



Y



Un proceso de carburización basado solamente sobre la descomposición del monóxido de carbono ( $CO$ ) requerirá grandes velocidades de flujo de la atmósfera gaseosa para producir un carburizado apreciable. Por ésta razón, el enriquecimiento con metano del gas endotérmico suministra el carbono para el proceso debido a una reacción lenta, tal como:



Y



El cual reduce las concentraciones de los productos  $CO_2$  y  $H_2O$  de (2.8) y (2.9), respectivamente; estas reacciones regeneran el  $CO$  y el  $H_2$ , de acuerdo al principio de Le Chatelier, direccionan las reacciones de (2.8) y (2.9) hacia la derecha [31]. Debido a que el contenido de metano está en una concentración superior a la esperada en el equilibrio, y dado que existen concentraciones de  $CO_2$  y  $H_2O$ , es evidente que las reacciones en (2.10) y (2.11) no se acercan al equilibrio.

Sumando las reacciones (2.8), (2.10) y (2.9), (2.11) obtenemos:



Así, manteniendo constante la concentración de  $CO_2$  y el punto de rocío ( $H_2O$ ) durante el carburizado, la atmósfera gaseosa implicará la reducción de metano y el incremento en el contenido de hidrógeno.

Es por eso que en la mayoría de las empresas las velocidades de flujo de la atmósfera son lo suficientemente altas, y la velocidad de descomposición del metano lo suficientemente baja, para prevenir la acumulación de hidrógeno durante el ciclo de

carburizado. Sin embargo, en las cargas de carburizado que presentan mayor área superficial, existe una caída en el contenido de  $CO$  de 1 a 3 % al inicio del ciclo, cuando la demanda de carbono es mayor, debido a la dilución de la atmósfera con el hidrógeno.

Para controlar el potencial de carbono es necesario variar la velocidad de flujo del gas de enriquecimiento, mientras se mantiene constante el flujo del gas endotérmico, y para esto se monitorean las concentraciones de algunos constituyentes de la atmósfera, como son:

- Contenido de vapor de agua a través del punto de rocío.
- Contenido de dióxido de carbono por análisis de gas infrarrojo.
- Potencial de oxígeno usando sensor de zirconio.

Las primeras dos cantidades proveen medidas del potencial de carbono, de acuerdo a las reacciones (2.8), (2.9) y la última, de acuerdo a la reacción:



Cuando el contenido de monóxido de carbono de la atmósfera permanece relativamente constante, tanto el dióxido de carbono como el potencial de oxígeno proveen una buena medida del potencial de carbono. Para que el punto de rocío sea una medida válida del potencial de carbono, el producto del contenido de hidrógeno y el contenido del monóxido de carbono deben ser estables (reacción 2.11). Por otro lado, si el contenido de hidrógeno en la atmósfera se eleva, como resultado del carburizado (reacción 2.12) o hollín, la relación entre los contenidos de  $CO_2$ , potencial de oxígeno, punto de rocío y el potencial de carbono serán alterados, y por ésta razón algunos sistemas de control de procesos incluyen el análisis infrarrojo del  $CO$  y del  $CO_2$ , o potencial de oxígeno, de manera que sea correcta la medición del potencial de carbono para todas las condiciones de operación.

## 2.2 TEMPLE

Se refiere al proceso de enfriar rápidamente una pieza de acero desde la temperatura de austenización en un medio de temple, para obtener una microestructura martensítica; dicha microestructura no está restringida solamente a los aceros, sin embargo, adquiere importancia tecnológica debido a sus propiedades.

La velocidad de enfriamiento debe ser lo suficientemente rápida para evitar toda aquella transformación en estado sólido como, por ejemplo, la formación de ferrita y perlita, pero lo bastante lenta para aceros aleados que contienen grandes concentraciones de elementos gamágenos o estabilizadores de austenita [29].

La selección del medio de temple está en función de la templabilidad de la aleación en particular, de su espesor, de su forma y de la velocidad de enfriamiento necesaria para lograr la microestructura deseada; los más comunes son los líquidos y gases, y dentro de los líquidos, dependiendo de su severidad de temple, se encuentran:

- Aceite que puede contener una variedad de aditivos
- Agua
- Soluciones de polímeros acuosos
- Agua que puede contener sales u otros aditivos cáusticos

Y los gases más comunes son inertes, tales como: He, Ar, N<sub>2</sub>, los cuales son utilizados después del austenizado en vacío [28].

Así, las propiedades de los aceros se pueden ver influenciadas cambiando las propiedades termodinámicas por los elementos aleantes (composición) o por modificación de los estados de equilibrio durante el enfriamiento. Por ejemplo, para aceros con transformación de austenita a ferrita, variando la velocidad de enfriamiento desde muy lenta a extremadamente rápida el esfuerzo de cedencia puede cambiar desde 200 MPa (microestructura de ferrita y carburos) hasta 2500 MPa (microestructura martensítica), por lo tanto, como ya se mencionó, la velocidad de enfriamiento durante el tratamiento térmico es muy importante [32].

### **2.2.1 Formación de Martensita**

El temple hasta la temperatura ambiente de la austenita en el acero promueve la formación de martensita, una fase muy dura en la que el carbono, anteriormente en solución sólida en la austenita, permanece en solución en la nueva fase. A diferencia de la ferrita y la perlita, la martensita se forma por la deformación de la red cristalina de la austenita sin difusión atómica. La deformación causa un cambio en la forma de la región transformada, que consiste en esfuerzo de corte y expansión de volumen. Por lo tanto, la transformación martensítica es considerada como un proceso sin difusión de

carbono, formada por un esfuerzo cortante, altamente cristalográfica debido a que se genera por deformación específica de la austenita.

La reacción de la martensita ocurre atómicamente, es decir, la fracción transformada depende solamente de la temperatura por debajo de  $M_s$  (temperatura de inicio de transformación martensítica); también dicha reacción es independiente del tiempo de acuerdo a la ecuación que describe el progreso de transformación por debajo de  $M_s$ , Ecuación (1.34).

$$F_m = 1 - \exp[-\alpha_m(M_s - T)]$$

Esta condición atómica es una consecuencia de la nucleación y el crecimiento rápido, por lo que el tiempo puede ser despreciado. De la Ecuación (1.34) es evidente que una fracción de austenita permanece sin transformar cuando  $T$  es cercano a la temperatura ambiente, nombrándose así como *austenita retenida*. También es claro que no existe  $M_f$ , es decir, la temperatura final de transformación martensítica. Sin embargo, por conveniencia se define frecuentemente el punto donde existe el 95% de transformación martensítica.

Una vez que se llega a  $M_s$  empieza la transformación martensítica, creciendo a una fracción significativa de la velocidad del sonido en el acero, razón por la cual no hay difusión atómica.

Para que la transformación austenita ( $\gamma$ )-martensita ( $\alpha'$ ) ocurra se requiere de un *plano común en la interfaz* ("habit plane" en inglés), debido que la formación de martensita involucra el movimiento coordinado de los átomos y, además, estarán las estructuras cristalinas austenita-martensita íntimamente relacionadas; la familia de planos paralelos entre estas celdas unidad son  $\{111\}$  para la austenita y  $\{110\}$  para la martensita, sin embargo, este plano es generalmente irracional. Otra condición es que la interfaz debe ser coherente o semi-coherente para que las dislocaciones sean capaces de deslizarse a medida que crece la martensita. Resulta que entre austenita y martensita no puede encontrarse una interfaz coherente libre de esfuerzos, lo mejor que se puede lograr es la semi-coherencia con solo una dirección en la interfaz que permanezca completamente coherente; esta dirección es conocida como *línea invariante*, la cual no rota ni se distorsiona.

El paso de una dislocación a través de la red cristalina causa la formación de un escalón donde el plano de deslizamiento intersecta la superficie libre, y el paso de varias dislocaciones sobre planos de deslizamiento paralelos causan un corte macroscópico en la forma solamente, más no en la estructura del cristal. Para el cambio en dicha estructura cristalina se necesitan dislocaciones responsables para la deformación en la interfaz  $\alpha'/\gamma$ , más el vector de Burgers.

### **2.2.1.1 Estructura cristalina de la martensita**

La martensita en el acero es una solución sólida sobresaturada de carbono en ferrita. Para materiales con baja  $M_s$  debido a la alta concentración de carbono, los átomos de carbono tienden a ordenarse de tal manera que la estructura cristalina cambia de cúbica centrada en el cuerpo ( $bcc$ ) a tetragonal centrada en el cuerpo ( $bct$ ), y la tetragonalidad de la martensita se mide por la razón de los ejes  $c/a$ , la cual incrementa con el contenido de carbono, lo que implica que cuando el contenido de carbono sea cero la estructura cristalina será  $bcc$ , es decir libre de distorsión.

Es interesante decir que el carbono en solución sólida intersticial expande uniformemente la red cristalina  $fcc$ , mientras que con  $bcc$  la expansión es no-simétrica surgiendo distorsión tetragonal, eso se debe a que en la red  $fcc$  hay seis átomos de hierro alrededor de cada átomo de carbono intersticial formando un octaedro regular, mientras que en  $bcc$  el octaedro no es regular, teniendo el eje  $z$  más corto, provocando que, la distorsión sea mayor en éste eje, respecto de las posiciones  $x, y$ .

Asumiendo que la transformación  $fcc - bcc$  ocurre sin difusión, es decir, los átomos de carbono no tienen oportunidad de moverse, la ferrita tiene tres intersticios octaédricos por átomo de hierro, mientras que la austenita sólo tiene un intersticio octaédrico por átomo de hierro, de manera que la relación es 3:1, respectivamente, lo que causa la distorsión tetragonal de  $bcc$  a  $bct$ . La tetragonalidad de la martensita surge como resultado directo de los átomos intersticiales de carbono en  $bcc$ , y la preferencia por un tipo de sitio octaédrico particular impuesto por la reacción sin difusión.

### **2.2.1.2 La cristalografía de la transformación martensítica**

La deformación necesaria para cambiar la red cristalina de  $fcc$  de  $\gamma$  a  $bct$  de  $\alpha'$  fue propuesta por Bain en 1924, y es conocida como *Bain strain* en inglés, en la cual hay

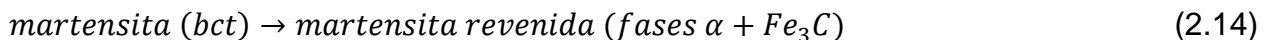
una compresión de aproximadamente 17 % a lo largo de la dirección [001] en la austenita, que corresponde al eje c de la martensita, y una expansión uniforme cerca del 12 % en el plano (001) de la austenita. Sin embargo, hay inconsistencia con la relación de la orientación observada, debido a que el modelo de Bain por sí mismo no completa la deformación, porque es necesario asegurar un alto grado de coherencia en la interfaz. Es un requisito que la deformación de  $\gamma \rightarrow \alpha'$  produzca una línea completamente coherente (sin rotación ni distorsión), es decir, una línea invariable; a esta deformación se le conoce en inglés como *invariant-line strain (ILS)*. Así, el efecto combinado de la deformación de Bain y la rotación de un cuerpo rígido produce una ILS y, por consecuencia, la transformación martensítica será posible.

Existen dos tipos de martensita en función del porcentaje de carbono. Para que se forme martensita *lath* es necesario un bajo contenido de carbono en la austenita, con alta tenacidad y ductilidad pero baja resistencia, y para formar martensita *plate* es necesario un alto contenido de carbono en la austenita, con mayor resistencia pero con tendencia a la fragilidad y sacrificando ductilidad [9,29].

### 2.2.2 Martensita revenida

Después del tratamiento térmico del temple resulta la martensita, que además de ser muy dura es tan frágil que provocaría efectos perniciosos en la mayoría de las aplicaciones. Por lo tanto para aumentar la tenacidad y ductilidad es necesario realizar el tratamiento térmico de revenido, el cual también reduce los esfuerzos internos.

El revenido se realiza al calentar un acero martensítico a una temperatura por debajo de la eutectoide 727 °C (1341 °F) durante un periodo específico. Este tratamiento térmico permite la formación de martensita revenida por un proceso de difusión, de acuerdo con la reacción:



La microestructura de la martensita revenida consiste en partículas de cementita muy pequeñas (apreciables por microscopía electrónica) y uniformemente distribuidas en una matriz ferrítica continua, lo que aumenta la ductilidad y tenacidad del material, debido a dicha fase. La dureza y resistencia se deben al área superficial entre ferrita y cementita por unidad de volumen. Ya que la difusión de carbono es parte del proceso



de transformación mostrado en la Ecuación (2.14), el incremento de temperatura acelera la difusión, la velocidad de crecimiento de las partículas de cementita que coalescen y, por consiguiente, la disminución de dureza.

Ahora bien también existe el fenómeno de fragilidad de revenido, la cual está en función de las temperaturas del tratamiento térmico, de la composición química y del enfriamiento. Las aleaciones de hierro que son susceptibles a la fragilidad de revenido contienen concentraciones importantes de elementos tales como Mn, Ni y Cr, además de concentraciones relativamente bajas de impurezas como Sb, P, As y Sn, debido a que la presencia de estos elementos e impurezas desplazan la transición dúctil-frágil a temperaturas mucho más altas; de este modo la temperatura ambiente se sitúa por debajo de esta transición en el régimen frágil [33].

### 2.3 SIMULACIÓN NUMÉRICA

Existen procesos físicos que pueden ser representados por ecuaciones diferenciales de transporte, en donde el flujo de difusión es gobernado por un gradiente en la variable dependiente, siendo este la fuerza motriz para que ocurra la difusión, además de existir un principio de conservación. Tales procesos incluyen: la difusión de una especie química, el movimiento de partículas con carga en campos electromagnéticos, el flujo en materiales porosos, el flujo de potencial, el transporte de calor y humedad en sólidos, el flujo completamente desarrollado y la transferencia de calor en ductos. La ecuación diferencial general que representa la conservación de la variable dependiente se representa por [34]:

$$\lambda \frac{\partial \phi}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial x} \left( \Gamma \frac{\partial \phi}{\partial x} \right) + \frac{\partial}{\partial y} \left( \Gamma \frac{\partial \phi}{\partial y} \right) + \frac{\partial}{\partial z} \left( \Gamma \frac{\partial \phi}{\partial z} \right) + S \quad (2.15)$$

donde  $\phi$  es la variable dependiente que está en función de las variables independientes  $x, y$  y  $z$ ,  $\lambda$  es la capacidad de almacenamiento por unidad de volumen, que para el caso de la Ecuación de transporte de masa (1.1) está contenida en la difusividad de carbono ( $D$ ) con dimensiones de longitud<sup>2</sup>/tiempo, y para la Ecuación de transporte de temperatura (1.17) representa la capacidad calorífica  $\rho c$  por volumen,  $\Gamma$  es el coeficiente de difusión generalizado que, como ya se mencionó, para masa es la difusividad de carbono ( $D$ ) y para temperatura es la conductividad térmica ( $k$ ), misma

que al hacer  $k/\rho c$  da como resultado la difusividad térmica, la cual mide la capacidad de un material para conducir energía térmica en relación con la capacidad para almacenarla con dimensiones longitud<sup>2</sup>/tiempo, y  $S$  es la rapidez de generación por unidad de volumen o también llamado término fuente de la cantidad física relevante [34].

Los métodos para resolver la Ecuación (2.15) incluyen los enfoques analítico, gráfico y numérico (diferencias finitas, elemento finito y volumen finito). El método analítico implica obtener una solución matemática exacta y se complica aún en dos dimensiones, debido a que es una ecuación diferencial parcial y no ordinaria. Aunque se dispone de varias técnicas para resolver estas ecuaciones, las soluciones implican típicamente series y funciones matemáticas complicadas, que es posible obtener sólo para un conjunto restringido de geometrías simples y ciertas condiciones a la frontera. Con la solución exacta obtenida se puede calcular la variable dependiente ( $\phi$ ) en cualquier punto de interés. En contraste, los métodos gráfico y numérico proporcionan sólo resultados aproximados en puntos discretos. Sin embargo, como los métodos se adaptan a geometrías complejas y cualesquiera condiciones a la frontera, con frecuencia ofrecen los únicos medios para resolver problemas en tres dimensiones. El método gráfico, o de trazo de flujo, sirve de estimación aproximada del campo de la variable dependiente, en donde el dominio de cálculo se secciona por líneas de simetría consideradas como adiabáticas, mientras se trazan líneas perpendiculares a éstas llamadas isotermas. Es difícil crear en el dominio una red satisfactoria de cuadrados curvilíneos al primer intento, y con frecuencia deben realizarse numerosas iteraciones; este proceso de ensayo y error implica ajustar las líneas isotermas y adiabáticas. Una vez que se obtienen los cuadrados curvilíneos satisfactorios se logra la gráfica de flujo, que se utiliza para inferir la distribución de la variable dependiente en el medio, para posteriormente conocer el flujo de difusión que avanza a través de bandas, que son las regiones entre líneas adiabáticas contiguas y perpendiculares a las isotermas. En este método se introduce un concepto denominado factor de forma que, de acuerdo a la configuración del sistema, se selecciona de tablas preestablecidas para sistemas bidimensionales, principalmente, con sus respectivas restricciones [35].

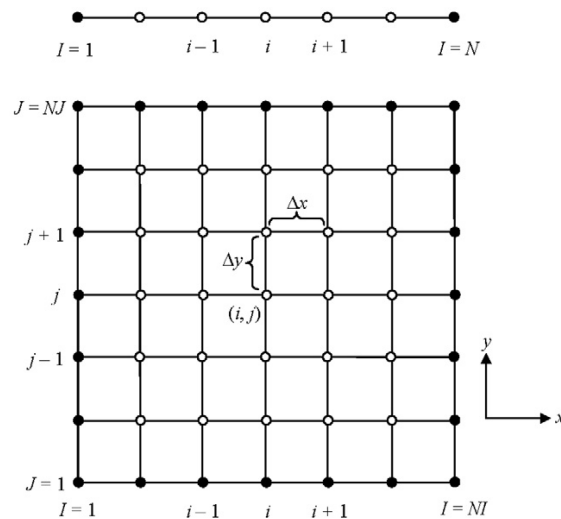
Es evidente, entonces, que las limitaciones de los métodos analíticos en aplicaciones prácticas han contribuido a la evolución de los métodos numéricos. Por lo tanto, el objetivo del análisis numérico es proveer métodos constructivos para obtener respuestas a diferentes problemas en una forma numérica, tales como diferencias finitas, elemento finito y volumen finito.

### **2.3.1 Diferencias finitas**

El método de diferencias finitas es el más antiguo de los métodos de soluciones numéricas de ecuaciones diferenciales parciales; se cree que fue desarrollado por Euler en 1768 y se usaba originalmente en papel. En este método la solución numérica tiene como objetivo proporcionar valores de la variable dependiente en un número discreto de puntos de un dominio de cálculo como el que se muestra en la Figura 2.1. Dichos puntos son llamados nodos, y al proceso de convertir la ecuación de transporte que gobierna en el dominio físico en un conjunto de ecuaciones algebraicas para los valores discretos de la variable dependiente se le llama proceso de discretización. Así, los métodos específicos empleados para hacer dicha conversión se llaman métodos de discretización.

En particular, una desventaja del método de diferencias finitas es la dificultad para aplicarse a sistemas con geometría irregular, con condiciones a la frontera no usuales.

Las expansiones de la serie de Taylor son utilizadas para generar aproximaciones de diferencias finitas en las derivadas parciales de las ecuaciones gobernantes. En principio, éste método puede ser aplicado a cualquier tipo de sistema de red o malla. Sin embargo, el método es aplicado comúnmente a mallas estructuradas, debido a que requieren una malla con alto grado de regularidad. El espacio entre los nodos no necesita ser uniforme, pero se pueden imponer límites sobre la distorsión de red para mantener la precisión. De este modo, las diferencias finitas permiten la incorporación de aproximaciones diferenciales de alto orden sobre una red regular, la cual provee un alto grado de precisión en la solución.



**Figura 2.1** Nodos distribuidos uniformemente en el plano Cartesiano en una y dos dimensiones por el método de diferencias finitas (los círculos negros denotan los nodos de frontera y los blancos al interior del dominio denotan los nodos computacionales) [36].

En el método de diferencias finitas la malla es, usualmente, estructurada localmente, lo cual significa que cada nodo puede ser considerado como el origen de un sistema de coordenadas locales, debido a que los ejes  $x, y$  y  $z$  coinciden con las líneas de la malla. Para un sistema bidimensional cualquier par de líneas en la red sólo se intersectan en cualquiera de los nodos, y para un sistema tridimensional existen tres líneas que se intersectan exclusivamente en cada nodo, los cuales son identificados por  $(i, j)$  e  $(i, j, k)$ , respectivamente, en donde los nodos vecinos son definidos incrementando o reduciendo cualquiera de los índices por unidad, como se muestra en la Figura 2.1. Para ilustrar el método de diferencias finitas se asume que el espaciamiento entre los nodos de la dirección  $x$  y  $y$  es uniforme, representado por  $\Delta x$  y  $\Delta y$ , respectivamente, aunque, como ya se mencionó, no necesariamente tiene que ser uniforme, es decir se podría trabajar con mallas irregulares en ambas direcciones. Este espaciamiento uniforme no necesariamente tiene que corresponder a un espacio físico  $x - y$ , como es frecuentemente manejado en dinámica de fluidos computacional (*CFD*, por sus siglas en inglés), en donde los cálculos numéricos se llevan a cabo en un espacio computacional transformado que posee un espaciamiento uniforme en las variables independientes transformadas, que corresponden a un espaciamiento no uniforme en un dominio físico o real.

El punto de partida para la representación de las derivadas parciales en las ecuaciones gobernantes es la expansión de la serie de Taylor. Por ejemplo, en relación a la Figura 2.1, en los índices  $(i, j)$  existe una variable dependiente general  $\phi$ , como la que se muestra en la Ecuación (2.15), después la variable en el punto  $(i + 1, j)$  puede ser expresada en términos de la serie de Taylor expandida respecto del punto  $(i, j)$ , como:

$$\phi_{i+1,j} = \phi_{i,j} + \left(\frac{\partial\phi}{\partial x}\right)_{i,j} \Delta x + \left(\frac{\partial^2\phi}{\partial x^2}\right)_{i,j} \frac{\Delta x^2}{2!} + \left(\frac{\partial^3\phi}{\partial x^3}\right)_{i,j} \frac{\Delta x^3}{3!} + \dots + \left(\frac{\partial^n\phi}{\partial x^n}\right)_{i,j} \frac{\Delta x^n}{n!} \quad (2.16)$$

De manera similar, la variable en el punto  $(i - 1, j)$  puede ser expresada en términos de la serie de Taylor cerca del punto  $(i, j)$ , como:

$$\phi_{i-1,j} = \phi_{i,j} - \left(\frac{\partial\phi}{\partial x}\right)_{i,j} \Delta x + \left(\frac{\partial^2\phi}{\partial x^2}\right)_{i,j} \frac{\Delta x^2}{2!} - \left(\frac{\partial^3\phi}{\partial x^3}\right)_{i,j} \frac{\Delta x^3}{3!} + \dots + \left(\frac{\partial^n\phi}{\partial x^n}\right)_{i,j} \frac{\Delta x^n}{n!} \quad (2.17)$$

Las Ecuaciones (2.16) y (2.17) son matemáticamente expresiones exactas para las variables respectivas  $\phi_{i+1,j}$  y  $\phi_{i-1,j}$ , si el número de términos es infinito, las series convergen. Restando las dos ecuaciones y despejando la primera derivada, se obtiene la aproximación de la derivada de primer orden de  $\phi$ :

$$\left(\frac{\partial\phi}{\partial x}\right) = \frac{\phi_{i+1,j} - \phi_{i-1,j}}{2\Delta x} - \frac{\frac{1}{3}\left(\frac{\partial^3\phi}{\partial x^3}\right)\Delta x^3}{2\Delta x} \quad (2.18)$$

o

$$\text{diferencia central: } \left(\frac{\partial\phi}{\partial x}\right) = \frac{\phi_{i+1,j} - \phi_{i-1,j}}{2\Delta x} + \frac{O(\Delta x^2)}{\text{Error de truncamiento}} \quad (2.19)$$

en donde el término  $O(\Delta x^n)$  representa el error de truncamiento de la aproximación de las diferencias finitas, el cual resulta porque se usa una aproximación en lugar de un procedimiento matemático exacto, y mide la exactitud de la aproximación, además determina la velocidad de disminución del error a medida que se reduce el espaciamiento entre los puntos, es decir, el error es proporcional al incremento  $\Delta x$  elevado a la  $n$ -ésima potencia. Por ejemplo, si el error es  $O(\Delta x)$  y el incremento se reduce a la mitad, entonces el error también se reducirá a la mitad. Por otro lado, si el error es  $O(\Delta x^2)$  y el incremento se reduce a la mitad, entonces el error se reducirá a una cuarta parte. En general, se considera que el error de truncamiento disminuye agregando términos a la serie de Taylor. Así, la Ecuación (2.19) tiene exactitud de segundo orden debido a que el error de truncamiento es de orden 2, esto es una mayor

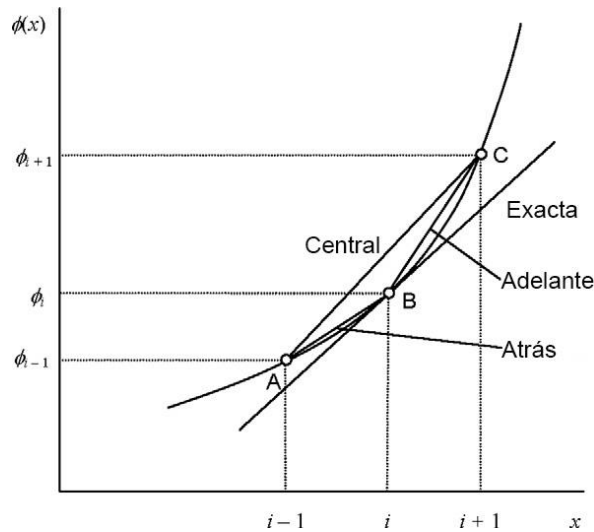
simplificación, y su validez depende del tamaño  $\Delta x$ . Esta ecuación es llamada *diferencia central* debido a que depende igualmente de los valores en ambos lados del nodo en  $x$ . También es posible formar otras expresiones para la derivada de primer orden involucrando las Ecuaciones (2.16) y (2.17), las cuales son:

$$\text{diferencia hacia adelante: } \left(\frac{\partial\phi}{\partial x}\right) = \frac{\phi_{i+1,j} - \phi_{i,j}}{\Delta x} + \frac{O(\Delta x)}{\text{Error de truncamiento}} \quad (2.20)$$

y

$$\text{diferencia hacia atrás: } \left(\frac{\partial\phi}{\partial x}\right) = \frac{\phi_{i,j} - \phi_{i-1,j}}{\Delta x} + \frac{O(\Delta x)}{\text{Error de truncamiento}} \quad (2.21)$$

La interpretación geométrica de las Ecuaciones (2.19), (2.20) y (2.21) está representada en la Figura 2.2. La derivada de primer orden  $\partial\phi/\partial x$  en el punto  $i$  en la dirección de  $x$  es la pendiente de la tangente de la curva  $\phi(x)$  en ese punto, representada por la línea marcada como “exacta” en la figura. Su pendiente puede ser aproximada por la pendiente de una línea que pasa a través de los nodos vecinos,  $i + 1$  e  $i - 1$ , sobre la curva. La diferencia hacia adelante es evaluada por la pendiente BC entre los puntos  $i$  e  $i + 1$ , mientras que la diferencia hacia atrás se logra por la pendiente AB entre los puntos  $i - 1$  e  $i$ . La línea etiquetada como central representa la aproximación por una diferencia central que evalúa la pendiente AC. En la Figura 2.2 se aprecia que algunas aproximaciones son mejores que otras, por ejemplo la pendiente AC parece más cercana y paralela a la pendiente de la línea exacta; si la función  $\phi(x)$  fuera un polinomio de segundo orden y se le agrega un término de segundo orden a la serie de Taylor, se obtiene algo de curvatura que representa y se ajusta a la función. En particular esta es la esencia del teorema de Taylor, en donde cualquier función suave puede aproximarse por un polinomio.



**Figura 2.2** Representación de diferencias finitas de las derivadas de primer orden para  $\partial\phi/\partial x$  [36].

Las diferencias para las derivadas en el eje  $y$  se obtienen exactamente de la misma manera que para  $x$ .

$$\text{diferencia central: } \left(\frac{\partial\phi}{\partial y}\right) = \frac{\phi_{i,j+1} - \phi_{i,j-1}}{2\Delta y} + \frac{o(\Delta y^2)}{\text{Error de truncamiento}} \quad (2.22)$$

$$\text{diferencia hacia adelante: } \left(\frac{\partial\phi}{\partial y}\right) = \frac{\phi_{i,j+1} - \phi_{i,j}}{\Delta y} + \frac{o(\Delta y)}{\text{Error de truncamiento}} \quad (2.23)$$

$$\text{diferencia hacia atrás: } \left(\frac{\partial\phi}{\partial y}\right) = \frac{\phi_{i,j} - \phi_{i,j-1}}{\Delta y} + \frac{o(\Delta y)}{\text{Error de truncamiento}} \quad (2.24)$$

La derivada de segundo orden también se puede obtener a través de la expansión de la serie de Taylor, como se aplicó para la aproximación de la derivada de primer orden, sumando las Ecuaciones (2.16) y (2.17) se obtiene:

$$\left(\frac{\partial^2\phi}{\partial x^2}\right) = \frac{\phi_{i+1,j} - 2\phi_{i,j} + \phi_{i-1,j}}{\Delta x^2} + \frac{o(\Delta x^2)}{\text{Error de truncamiento}} \quad (2.25)$$

Esta ecuación representa la diferencia finita central para la derivada de segundo orden con respecto a  $x$  evaluada en el punto  $(i, j)$ . Una expresión similar puede obtenerse para la derivada de segundo orden respecto de  $y$ :

$$\left(\frac{\partial^2\phi}{\partial y^2}\right) = \frac{\phi_{i,j+1} - 2\phi_{i,j} + \phi_{i,j-1}}{\Delta y^2} + \frac{o(\Delta y^2)}{\text{Error de truncamiento}} \quad (2.26)$$

Considerando una ecuación diferencial parcial en dos dimensiones, en condiciones de estado estacionario, sin generación por unidad de volumen de la cantidad física, y

coeficiente de difusión generalizado constante, sobre la Ecuación diferencial parcial general (2.15) se obtiene:

$$\frac{\partial^2 \phi}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 \phi}{\partial y^2} = 0 \quad (2.27)$$

la cual se discretiza para cada nodo interno sustituyendo las Ecuaciones de diferencias finitas (2.25) y (2.26), además de considerar una malla uniforme  $\Delta x = \Delta y$ , obteniendo la ecuación algebraica aproximada:

$$\phi_{i,j+1} + \phi_{i,j-1} + \phi_{i+1,j} + \phi_{i-1,j} - 4\phi_{i,j} = 0 \quad (2.28)$$

De ahí que para conocer el valor de la variable dependiente en el nodo  $i, j$ , este será un cuarto del valor de la suma de la variable dependiente de los nodos vecinos. La ecuación anterior para cada nodo interno también se obtiene aplicando la conservación de la energía a un volumen de control alrededor de la región nodal. Como la dirección real del flujo (dentro o fuera del nodo) a menudo se desconoce, es conveniente formular el balance de energía suponiendo que todo el flujo es hacia el nodo. Tal condición es, por supuesto, imposible, pero si las ecuaciones de flujo se expresan de manera congruente con esta suposición, se obtiene la Ecuación (2.28).

Las ecuaciones de diferencias finitas anteriores se dedujeron sobre los nodos internos del dominio de cálculo, en donde normalmente se desconoce el valor de la variable dependiente. Sin embargo, los nodos superficiales están expuestos a diferentes condiciones, por lo que es necesario discretizar la ecuación que rige el comportamiento físico en función de la posición y condición referida para cada nodo, generalmente empleando un balance de energía.

Así como se obtiene una ecuación utilizando la expansión de la serie de Taylor para el espacio, se pueden obtener también ecuaciones similares de derivadas parciales respecto del tiempo, en donde la solución numérica es más probable que se manifieste continuamente en un intervalo de tiempo discreto  $\Delta t$  [36].

Para obtener la ecuación de diferencias finitas en las condiciones de estado estacionario se podría usar la aproximación de la Ecuación de diferencias centrales (2.25) y (2.26). Sin embargo, además de discretizar respecto del espacio, ahora se hará en función del tiempo; para conseguir lo anterior, la aproximación de la derivada de la



variable dependiente ( $\phi$ ) respecto del tiempo, para cada nodo específico, se expresa en términos de la diferencia de  $\phi$  asociada al nuevo valor del tiempo ( $t + 1$ ) y al tiempo ( $t$ ) previo. Por lo tanto, los cálculos se realizan en tiempos sucesivos separados por el intervalo  $\Delta t$ , lo que implica la aproximación de la Ecuación diferencial de primer orden por diferencias finitas hacia adelante (2.20) y (2.23).

Una vez que se establece la red nodal y se escribe una ecuación de diferencias finitas apropiada para cada nodo, es posible determinar la distribución de  $\phi$ . El problema se reduce a resolver un sistema de ecuaciones algebraicas lineales [35].

### **2.3.2 Elemento finito**

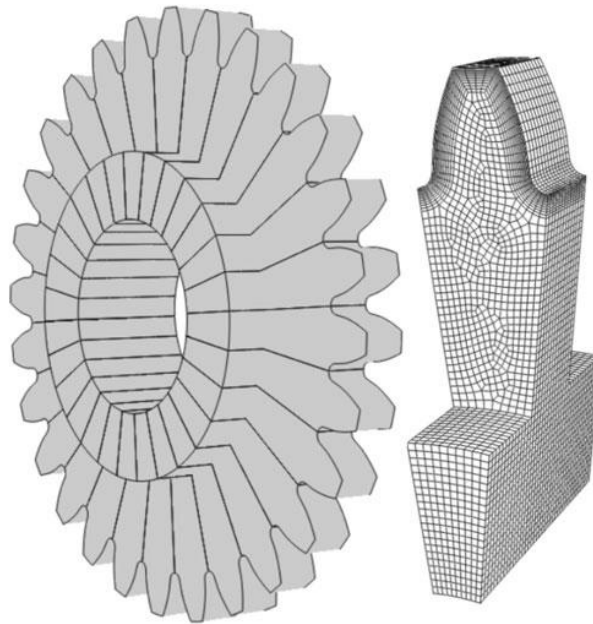
El método del elemento finito (*FEM*, por sus siglas en inglés) se remonta a trabajos realizados entre 1940 y 1960 en el campo de la mecánica estructural, el término “elemento finito” fue introducido por Clough en 1960. Hoy en día el FEM es ampliamente utilizado en cálculos numéricos de mecánica de sólidos y puede considerarse como una herramienta estándar en dicho campo. Sin embargo, también se ha utilizado en otras áreas de aplicación [37].

El método del elemento finito ofrece una alternativa que es adecuado para sistemas con geometría irregular, con condiciones a la frontera no usuales; dependiendo de la dimensión espacial del problema usualmente se utilizan los tipos de elementos siguientes:

- 1-dimensión: sub-intervalos
- 2-dimensiones: triángulos, cuadriláteros, elementos curvilíneos;
- 3-dimensiones: tetraedros, hexaedros, prismas, elementos curvilíneos.

A diferencia de la técnica por diferencias finitas, la técnica de elemento finito divide el dominio de la solución en regiones con formas sencillas o “elementos”. Se puede desarrollar una solución aproximada de la ecuación diferencial parcial para cada uno de estos elementos, la solución total se genera uniendo, o “ensamblando”, las soluciones individuales, teniendo cuidado de asegurar la continuidad de las fronteras entre los elementos, de modo que la ecuación diferencial parcial se satisface por secciones. Como se observa en la Figura 2.3, el uso de elementos, en lugar de una malla rectangular, proporciona una mejor aproximación para sistemas con forma irregular. Un

sistema así es muy difícil de modelar con el método de diferencias finitas, debido al hecho de que se necesitan aproximaciones complicadas en las fronteras del sistema y en las fronteras de cambio de sección en la pieza; una discretización por elementos finitos es más adecuada para tales sistemas. Además, se pueden generar continuamente valores de las incógnitas a través de todo el dominio de la solución en lugar de puntos aislados.



**Figura 2.3** Engrane con geometría irregular [14].

Aunque las particularidades varían, la implementación del método del elemento finito usualmente sigue un procedimiento estándar paso a paso.

### *Discretización*

Este paso consiste en dividir el dominio de la solución en elementos finitos en una, dos y tres dimensiones. Los puntos de intersección de las líneas que forman los lados de los elementos se conocen como nodos, y los mismos lados se denominan líneas o planos nodales. El punto de comienzo de la numeración de los elementos es arbitrario, solo se debe respetar el mismo orden para cada elemento.

### *Ecuaciones de los elementos*

El siguiente paso consiste en desarrollar ecuaciones para aproximar la solución de cada elemento, y consta de dos pasos: 1) se debe elegir una función apropiada con

coeficientes desconocidos que aproximará la función  $y$ , 2) se evalúan los coeficientes de modo que la función aproxime la solución de manera óptima.

*Elección de las funciones de aproximación.*

Debido a que son fáciles de manipular matemáticamente, con frecuencia se utilizan polinomios para este propósito. En el caso unidimensional, la alternativa más sencilla es un polinomio de primer grado o línea recta:

$$\phi(x) = b_0 + b_1x \quad (2.29)$$

y en problemas bidimensionales, por ejemplo para un elemento triangular, la aproximación más sencilla es el polinomio lineal:

$$\phi(x, y) = b_0 + b_1x + b_2y \quad (2.30)$$

donde  $\phi(x)$  y  $\phi(x, y)$  son las variables dependientes,  $b_i (i = 0,1,2)$  son los coeficientes y  $x, y$  son las variables independientes. Esta función debe pasar a través de los valores de las variables dependientes en los nodos extremos del elemento en  $x_1$  y  $x_2$ , para una dimensión y en los nodos del triángulo  $(x_1, y_1)$ ,  $(x_2, y_2)$  y  $(x_3, y_3)$  para dos dimensiones. Por lo tanto, usando la regla de Cramer para ambas dimensiones se obtiene el valor de los coeficientes:

$$b_i (i = 0,1,2) = \frac{\Delta_{b_i}}{\Delta} \quad (2.31)$$

donde  $\Delta_{b_i}$  es el determinante de la matriz para cada coeficiente, que se realiza cambiando la columna de los coeficientes ( $b_i$ ) por la columna de los términos de la variable dependiente ( $\phi_i$ ), y  $\Delta$  denota el determinante de la matriz de los coeficientes o determinante de Jacobi ( $J_a$ ) [37]. Una vez que se encuentran los coeficientes se sustituyen en las Ecuaciones (2.29) y (2.30), y se reagrupan términos semejantes; el resultado se expresa para una y dos dimensiones como sigue:

$$\phi = N_1\phi_1 + N_2\phi_2; \quad \phi = N_1\phi_1 + N_2\phi_2 + N_3\phi_3 \quad (2.32)$$

donde para:

*una dimensión*

$$N_1 = \frac{x_2 - x}{x_2 - x_1} \quad N_2 = \frac{x - x_1}{x_2 - x_1} \quad (2.33)$$

y dos dimensiones

$$N_1 = \frac{1}{2A_e} [(x_2y_3 - x_3y_2) + (y_2 - y_3)x + (x_3 - x_2)y] \quad (2.34)$$

$$N_2 = \frac{1}{2A_e} [(x_3y_1 - x_1y_3) + (y_3 - y_1)x + (x_1 - x_3)y] \quad (2.35)$$

$$N_3 = \frac{1}{2A_e} [(x_1y_2 - x_2y_1) + (y_1 - y_2)x + (x_2 - x_1)y] \quad (2.36)$$

donde  $A_e$  es el área del elemento triangular:

$$A_e = \frac{1}{2} [(x_2y_3 - x_3y_2) + (x_3y_1 - x_1y_3) + (x_1y_2 - x_2y_1)] \quad (2.37)$$

Esta área representa la mitad del determinante de Jacobi ( $J_a$ ).

La Ecuación (2.32) se conoce como función de aproximación o de forma, y  $N_i (i = 1,2,3)$  se denominan funciones de interpolación. Una inspección cuidadosa revela que tal ecuación para un sistema unidimensional es, en realidad, el polinomio de interpolación de primer grado de Lagrange, y ofrece un medio para predecir valores intermedios (interpolación) en el elemento, con base en los valores de la variable dependiente ( $\phi$ ) en los nodos.

*Obtención de un ajuste óptimo de la función a la solución.*

Una vez que se eligió la función de interpolación se debe desarrollar la ecuación que rige el comportamiento del elemento. Esta ecuación representa un ajuste de la función a la solución de la ecuación diferencial de que se trate. Existen varios métodos para este propósito, entre los más comunes están el método directo, el método de los residuos ponderados y el método variacional, los resultados de todos estos métodos son análogos al ajuste de curvas. Sin embargo, en lugar de ajustar funciones a datos, estos métodos especifican relaciones entre las incógnitas de la Ecuación (2.32) que satisfacen de manera óptima la ecuación diferencial parcial.

El método de los residuos ponderados consiste en encontrar un mínimo para el residuo, debido a que la solución de ecuaciones que rigen el comportamiento físico son aproximaciones; es decir, no hay solución exacta, así la ecuación resultante no será cero, sino que será igual a un residuo, el cual tiene la fórmula general:

$$\int_{D'} R' W_i dD' = 0 \quad i = 1, 2, \dots, m \quad (2.38)$$

donde  $D'$  representa el dominio de la solución y  $W_i$  son las funciones de ponderación linealmente independientes. Aquí se tienen múltiples opciones para las funciones de ponderación, sin embargo, el procedimiento más común para el método del elemento finito consiste en emplear las funciones de interpolación  $N_i$  (Ecuación (2.33)) como las funciones de ponderación. Cuando estas se sustituyen en la Ecuación (2.38), el resultado se conoce como el método de Galerkin:

$$\int_{D'} R' N_i dD' = 0 \quad i = 1, 2, \dots, m \quad (2.39)$$

Matemáticamente, las ecuaciones del elemento resultante consisten en un sistema de ecuaciones algebraicas lineales que pueden expresarse en forma matricial:

$$[m]\{\phi\} = \{F\} \quad (2.40)$$

donde  $[m]$  es una propiedad del elemento o matriz de rigidez,  $\{\phi\}$  es el vector columna de las incógnitas en los nodos y  $\{F\}$  es el vector de carga determinado por el efecto de cualquier influencia externa aplicada a los nodos.

### *Ensamble*

Una vez obtenidas las ecuaciones de los elementos individuales, estas deben unirse o ensamblarse para caracterizar el comportamiento de todo el sistema. El proceso de ensamble está regido por el concepto de continuidad. Es decir, las soluciones de los elementos contiguos se acoplan, de manera que los valores de las incógnitas (y algunas veces las derivadas) en sus nodos comunes sean equivalentes. Así, la solución total será continua.

Cuando finalmente todas las versiones individuales de la Ecuación (2.40) están ensambladas, el sistema completo se expresa en forma matricial como:

$$[m]\{\phi'\} = \{F'\} \quad (2.41)$$

donde  $[m]$  es la matriz de las propiedades de ensamble global, y  $\{\phi'\}$  y  $\{F'\}$  son los vectores columna ensamblados de las incógnitas y de las fuerzas externas respectivamente.

### Condiciones de frontera

Antes de resolver la Ecuación (2.41), esta debe modificarse para considerar las condiciones de frontera del sistema. Dichos ajustes dan como resultado:

$$[\bar{m}]\{\phi'\} = \{\bar{F}'\} \quad (2.42)$$

donde la barra significa que las condiciones de frontera se han incorporado. Así, las condiciones de frontera de Neumann o Dirichlet requieren la evaluación de las integrales en la frontera, contribuyendo adicionalmente al vector de carga  $\{F\}$ . Para el cálculo elemental de las integrales se emplean las funciones de forma (Ecuación (2.32)) en la frontera, para un sistema en una dimensión, debido a que se consideran los lados o planos nodales (una dimensión) cercanos a las fronteras, en las direcciones  $x$  o  $y$ .

Partiendo de la ecuación unidimensional de Poisson en  $x$ , por ejemplo:

$$\frac{d^2 \phi}{dx^2} = -f(x) \quad (2.43)$$

y considerando el método de los residuos ponderados se obtiene la versión final de las ecuaciones de los elementos, expresada en forma matricial:

$$\frac{1}{x_2-x_1} \begin{bmatrix} 1 & -1 \\ -1 & 1 \end{bmatrix} \{\phi\} = \left\{ \begin{array}{l} -\frac{d\phi(x_1)}{dx} \\ \frac{d\phi(x_2)}{dx} \end{array} \right\} + \left\{ \begin{array}{l} \int_{x_1}^{x_2} f(x)N_1(x) dx \\ \int_{x_1}^{x_2} f(x)N_2(x) dx \end{array} \right\} \quad (2.44)$$

Así, la matriz de rigidez del elemento (lado izquierdo de la Ecuación (2.44)) representa los mecanismos internos que rigen la distribución de  $\phi$  de los elementos, siendo la matriz de propiedad de acuerdo al método del elemento finito. Del lado derecho de la igualdad, el primer término representa las condiciones de frontera de los elementos, y el segundo término son las integrales respecto del efecto de la función de fuerza del sistema.

### Solución

Las soluciones de la Ecuación (2.42) se obtienen con técnicas tales como eliminación de Gauss, inversión de matrices entre otras [38].

### 2.3.3 Volumen finito

El método numérico del volumen finito transforma las ecuaciones diferenciales parciales que representan las leyes de conservación en ecuaciones algebraicas en un volumen infinitesimal de control (elemento o celda). Al igual que los dos métodos anteriores, el primer paso en el proceso de solución es la discretización del dominio geométrico en volúmenes finitos o elementos no superpuestos. El sistema de ecuaciones algebraicas obtenidas de la discretización en cada volumen se resuelve para encontrar la variable dependiente para cada elemento. Este método es estrictamente conservativo, debido a que el flujo que entra en un volumen dado es igual al que abandona el volumen adyacente; esta propiedad inherente de conservación repercute en que sea el método más utilizado en dinámica de fluidos computacional. Otro atributo importante de este método es que puede ser formulado en un espacio físico complejo sobre elementos poligonales. Finalmente, es bastante fácil implementar una variedad de condiciones a la frontera de manera no invasiva, debido a que las variables desconocidas son evaluadas en los centroides de los elementos del volumen, en lugar de en las caras [39].

Para derivar la ecuación de transporte generalizada en un volumen determinado, por ejemplo en una dimensión, con generación por unidad de volumen de la cantidad física relevante o también conocido como término fuente ( $S$ ) y estado estacionario, representada por:

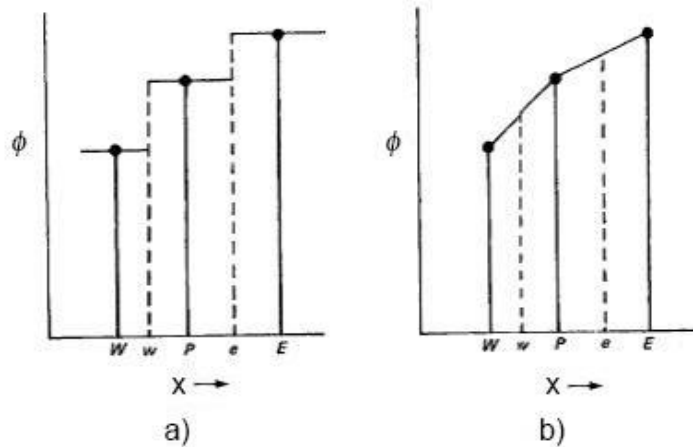
$$\frac{\partial}{\partial x} \left( \Gamma \frac{\partial \phi}{\partial x} \right) + S = 0 \quad (2.45)$$

el nodo en el punto  $P$ , al centroide del volumen o celda, está en función de los nodos vecinos  $E$  y  $W$  (donde  $E$  denota el lado este en la dirección  $x$  positiva y  $W$  el oeste en la dirección negativa), en donde se asume que el volumen tiene un espesor unitario en las dimensiones  $y$  y  $z$ . Integrando la Ecuación (2.45) sobre el volumen de control ( $\Delta x \cdot 1 \cdot 1$ ), se obtiene:

$$\left( \Gamma \frac{\partial \phi}{\partial x} \right)_e - \left( \Gamma \frac{\partial \phi}{\partial x} \right)_w + \int_w^e S dx = 0 \quad (2.46)$$

donde  $e$  y  $w$  denotan las caras del volumen de control al este y oeste, respectivamente. La resolución de la ecuación involucra la suposición de un perfil o una fórmula de interpolación; la Figura 2.4 muestra dos perfiles supuestos. La posibilidad más simple

es asumir que el valor de  $\phi$  en el nodo prevalece sobre el volumen de control que lo rodea, esto da el perfil escalonado de la Figura 2.4 (a); para este perfil, la pendiente  $d\phi/dx$  no está definida en las caras del volumen de control ( $w, e$ ). Un perfil que no sufre de esta dificultad es el perfil lineal por partes de la Figura 2.4 (b); aquí son usadas las funciones de interpolación lineal entre los nodos.



**Figura 2.4** Suposición de perfiles: a) escalonado, y b) lineal por partes [40].

Obteniendo la ecuación de discretización usando el perfil lineal por partes:

$$\frac{\Gamma_e(\phi_E - \phi_P)}{(\delta x)_e} - \frac{\Gamma_w(\phi_P - \phi_W)}{(\delta x)_w} + \bar{S}\Delta x = 0 \tag{2.47}$$

donde  $\bar{S}$  es el valor promedio de  $S$  en el volumen de control. Para este método, la ecuación discretizada en una dimensión queda de la siguiente manera estándar:

$$a_P \phi_P = a_E \phi_E + a_W \phi_W + b \tag{2.48}$$

donde

$$a_E = \frac{\Gamma_e}{(\delta x)_e} \tag{2.49a}$$

$$a_W = \frac{\Gamma_w}{(\delta x)_w} \tag{2.49b}$$

$$a_P = a_E + a_W \tag{2.49c}$$

$$b = \bar{S}\Delta x \tag{2.49d}$$



La variable dependiente en el punto  $P$  en el centro del volumen de control aparece en el lado izquierdo de la Ecuación (2.48), mientras que en los nodos vecinos los términos de la variable dependiente y la constante  $b$  forman los términos del lado derecho, así el número de nodos vecinos incrementa para dos y tres dimensiones:

$$a_P \phi_P = \sum a_{nb} \phi_{nb} + b \quad (2.50)$$

donde el subíndice  $nb$  denota el nodo vecino. Es importante señalar que no se necesita usar el mismo perfil lineal por partes para todas las cantidades. Por ejemplo,  $\bar{S}$  no se necesita calcular desde una variación lineal de  $S$  entre los nodos, o  $\Gamma_e$  desde una variación lineal de  $\Gamma$  entre  $\Gamma_P$  y  $\Gamma_E$ , incluso para una variable dada, no se necesita usar el mismo perfil lineal por partes para todos los términos de la ecuación. Por ejemplo, si la Ecuación (2.45) tuviera un término adicional que involucre sólo  $\phi$ , sería permisible utilizar el perfil escalonado para este término, debido a que no existe un gradiente  $d\phi/dx$ .

Con frecuencia el término fuente está en función de la variable dependiente  $\phi$ , y es deseable reconocer esta dependencia en la construcción de las ecuaciones de discretización, en la cual se considera una dependencia lineal debido a que las ecuaciones de discretización son resueltas por las técnicas de ecuaciones algebraicas lineales, así el término fuente  $S$ , después de la integración, resulta en un término promedio lineal  $\bar{S}$  en el cual:

$$\bar{S} = S_C + S_P \phi_P \quad (2.51)$$

donde  $S_C$  representa la parte constante de  $\bar{S}$ , mientras  $S_P$  es el coeficiente de  $\phi_P$ . La aparición de  $\phi_P$  en la Ecuación (2.51) revela que, al expresar el valor promedio de  $\bar{S}$ , se ha considerado que el valor de  $\phi_P$  prevalece sobre el volumen de control, en el cual se ha utilizado el perfil escalonado de la Figura 2.4 (a).

Con la expresión del término fuente linealizada, la ecuación de discretización sería igual a la Ecuación (2.48), a excepción de algunos cambios en los coeficientes derivados de la ecuación lineal para  $\bar{S}$  como, por ejemplo:

$$a_P \phi_P = a_E \phi_E + a_W \phi_W + b \quad (2.52a)$$

$$a_p = a_E + a_W - S_p \Delta x \quad (2.52b)$$

$$b = S_C \Delta x \quad (2.52c)$$

Existen 4 reglas básicas que las ecuaciones de discretización deben obedecer para asegurar la realidad del dominio físico y el balance total.

**Regla 1: Consistencia en las caras del volumen de control.** Cuando una cara es común a dos volúmenes de control adyacentes, el flujo debe ser representado por la misma expresión en las ecuaciones de discretización para los dos volúmenes de control, es decir, como ya se mencionó, el flujo que abandona un volumen de control a través de una cara en particular debe ser igual al flujo que entra en el próximo volumen de control a través de la misma cara, de otra manera el balance total no estaría satisfecho. Por lo tanto, es fundamental asegurar la consistencia en las caras de los volúmenes, debido a esto es que se utiliza un perfil lineal por partes y no un perfil cuadrático para el flujo en la interface  $\Gamma d\phi/dx$  que pasa a través de los nodos  $\phi_W, \phi_P$  y  $\phi_E$ . La aplicación del mismo tipo de formulación para el próximo volumen de control implica que el gradiente  $d\phi/dx$  en la interface común sea calculado desde diferentes perfiles, dependiendo de cuál volumen de control sea considerado, resultando en una inconsistencia en el gradiente y, por lo tanto, en el flujo en la interface, esto se podría evitar si la interface se localiza a la mitad de los nodos, debido a que la pendiente de una parábola es exactamente igual a la pendiente de la línea recta que une a los dos nodos; esta propiedad debe ser considerada como fortuita. Otra consideración que podría guiar a la inconsistencia del flujo es asumir que el flujo en las caras del volumen de control está gobernado por el coeficiente de difusión en el centro del volumen de control  $\Gamma_p$ . Así, el flujo en la interface  $e$  será expresado como  $\Gamma_p(\phi_P - \phi_E)/(\delta x)_e$  cuando se considere el volumen de control alrededor del punto  $P$ , y como  $\Gamma_E(\phi_P - \phi_E)/(\delta x)_e$  cuando se considere el punto  $E$ . Para evitar tal inconsistencia, es necesario recordar que el flujo en la interface es en la dirección donde disminuye el gradiente de  $\phi$ , es decir desde un valor de  $\phi$  mayor hacia un valor menor.

**Regla 2: Coeficientes positivos.** Implica que el valor de la variable dependiente  $\phi$  en un nodo sea influenciado por los valores de los nodos vecinos en los procesos de convección y difusión. Es decir, de acuerdo a la Ecuación general de volumen finito

(2.50), si hay un incremento en el valor  $\phi$  en un nodo debería incrementar el valor del nodo vecino, para esto los coeficientes  $a_{nb}$  y  $a_p$  deben tener el mismo signo, ya sea positivo o negativo; para este caso se decidió escribir las ecuaciones de discretización con coeficientes positivos (Ecuación (2.49)). Usualmente, si se viola esta regla la consecuencia será una solución no real en el dominio físico. La presencia de un coeficiente negativo en un nodo vecino puede guiar a una situación en la cual un incremento en el valor de  $\phi$  causa un decremento en el nodo adyacente.

**Regla 3:** *Pendiente negativa del término fuente lineal.* Esta regla está relacionada con la anterior. Considerando los coeficientes en la Ecuación (2.52b), se observa que, si los coeficientes en los nodos vecinos son positivos, el coeficiente  $a_p$  podría ser negativo vía  $S_p$ ; el peligro puede ser evitado requiriendo que  $S_p$  sea menor o igual a cero. Esta regla no es tan arbitraria como parece, debido a que la mayoría de los procesos físicos tienen una relación de pendiente negativa entre  $S$  y  $\phi$ . En realidad, si  $S_p$  fuera positivo, la situación física podría ser inestable, debido a que un valor positivo implica que cuando se incrementa  $\phi_p$  el término fuente incrementa.

**Regla 4:** *Suma de los coeficientes vecinos.* La ecuación diferencial gobernante contiene las derivadas de la variable dependiente, si  $\phi$  representa esa variable, las funciones  $\phi$  y  $\phi + c$  (donde  $c$  es una constante arbitraria) ambas satisfacen la ecuación diferencial. Esta propiedad debe aplicar también en la ecuación de discretización. Así, la Ecuación (2.50) debe ser válida incluso cuando  $\phi_p$  y todos los  $\phi_{nb}$  sean incrementados por una constante, así la expresión quedaría:

$$a_p = \sum a_{nb} \tag{2.53}$$

Es fácil ver que la Ecuación (2.48) satisface esta regla, que implica que el valor de  $\phi_p$  sea un promedio ponderado de los valores vecinos  $\phi_{nb}$ . Sin embargo, después de considerar el término lineal de  $\bar{S}$  en el coeficiente de la Ecuación (2.52b) ya no se obedece esta regla, evitando ser una violación, pero si un caso de inaplicabilidad de la regla, cuando  $S = f(\phi)$ ; ambos  $\phi$  y  $\phi + c$  no satisfacen la ecuación diferencial. Incluso en tales casos, la regla no debería olvidarse, pero debería ser aplicada concibiéndose como un caso especial de la ecuación. Si, por ejemplo,  $S_p = 0$  en la Ecuación (2.52b), la regla es aplicable y obedecida.

Respecto del coeficiente de difusión  $\Gamma$ , este requiere de una formulación propia para la no uniformidad. El procedimiento más sencillo para obtener  $\Gamma$  en la interface es asumir una variación lineal entre los puntos  $P$  y  $E$ , es decir,

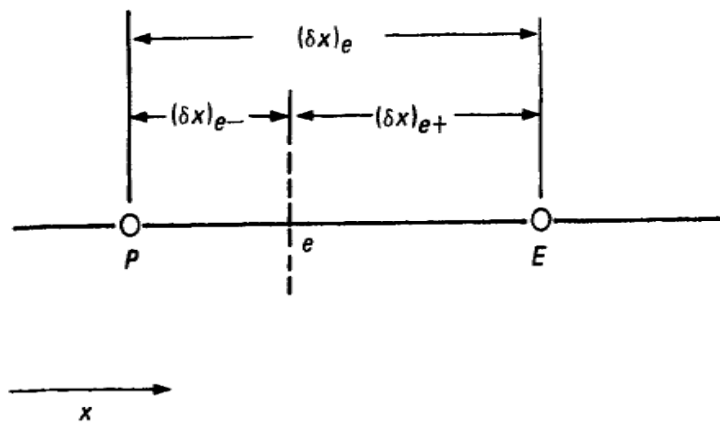
$$\Gamma_e = f_e \Gamma_P + (1 - f_e) \Gamma_E \quad (2.54)$$

donde

$$f_e = \frac{(\delta x)_{e+}}{(\delta x)_e} \quad (2.55)$$

$$1 - f_e = \frac{(\delta x)_{e-}}{(\delta x)_e} \quad (2.56)$$

donde  $(\delta x)_{e+}$  y  $(\delta x)_{e-}$  son las distancias hacia el este y oeste de la cara del volumen de control  $e$  respectivamente como se muestra en la Figura 2.5 y el factor de interpolación  $f_e$  es una razón definida en términos de éstas distancias. La Ecuación (2.54) es, en realidad, nuevamente igual que la Ecuación para una dimensión (2.32), el polinomio de interpolación de primer grado de Lagrange, el cual ofrece un medio para predecir valores intermedios entre dos puntos, en donde si la interface  $e$  estuviera a la mitad de los nodos,  $f_e$  sería 0.5, y  $\Gamma_e$  sería la media aritmética entre  $\Gamma_P$  y  $\Gamma_E$ .



**Figura 2.5** Distancias asociadas con la interface  $e$  [40].

Sin embargo, este acercamiento genera, en algunos casos, implicaciones incorrectas, sin poder manipular con precisión los cambios abruptos de  $\Gamma$  en materiales compuestos, para lo cual se busca una alternativa, y el objetivo es obtener una buena

representación del flujo en la interface, el cual se logra con una expresión correcta de  $\Gamma_E$  derivada de la ecuación para flujo. Cuando la interface  $e$  está justo a la mitad entre los puntos  $P$  y  $E$ , y  $f_e = 0.5$ , entonces

$$\Gamma_e = \frac{2\Gamma_P\Gamma_E}{\Gamma_P + \Gamma_E} \quad (2.57)$$

Así, esta ecuación representa la media armónica entre  $\Gamma_P$  y  $\Gamma_E$  en lugar de la media aritmética para  $f_e = 0.5$ .

Se mencionó que la Ecuación de discretización (2.52a) es una ecuación algebraica lineal, que se resuelve por los métodos para ecuaciones algebraicas lineales. Sin embargo, frecuentemente se encuentran situaciones de ecuaciones no lineales, incluso en conducción de calor. La conductividad  $k$  puede depender de la temperatura  $T$ , o el término fuente  $S$  puede ser una función no lineal de  $T$  y, en consecuencia, los coeficientes también dependerán de  $T$ . Tales situaciones se manejan por iteración, para llevar la ecuación no lineal a una lineal. Este proceso involucra los siguientes pasos:

1. Estimación o supuesto de los valores de  $\phi$  en todos los nodos.
2. De estos valores supuestos, se calculan valores tentativos de los coeficientes en la ecuación de discretización.
3. Se resuelve el conjunto de ecuaciones algebraicas lineales para conseguir nuevos valores de  $\phi$ .
4. Con los valores de  $\phi$  como mejores conjeturas regresamos al paso 2, y se repite el proceso hasta que las repeticiones adicionales (llamadas iteraciones) causen convergencia.

En ese punto se ha encontrado la solución correcta de las ecuaciones no lineales, aunque indirectamente se utilizó un método para ecuaciones lineales.

Con referencia a la ecuación diferencial general para  $\phi$  en el contexto unidimensional para un estado no estacionario y sin generación por unidad de volumen de la cantidad física relevante:

$$\lambda \frac{\partial \phi}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial x} \left( \Gamma \frac{\partial \phi}{\partial x} \right) \quad (2.58)$$

por conveniencia se asume que  $\lambda$  es constante. Debido a que el sentido del tiempo es en la dirección positiva, se obtiene una solución desde una distribución de  $\phi$  inicial. Así, conociendo los valores de la variable dependiente en los nodos al tiempo  $t$ , se encuentran los valores de  $\phi$  al tiempo  $t + \Delta t$ . Los valores en los nodos “previos” de  $\phi$  se denotan por  $\phi_P^0, \phi_E^0, \phi_W^0$ , y los “nuevos” valores al tiempo  $t + \Delta t$  por  $\phi_P^1, \phi_E^1, \phi_W^1$ .

La Ecuación (2.58) se deriva integrando sobre el volumen de control y sobre el intervalo de tiempo desde  $t$  hasta  $t + \Delta t$ . Así,

$$\lambda \int_w^e \int_t^{t+\Delta t} \frac{\partial T}{\partial t} dt dx = \int_t^{t+\Delta t} \int_w^e \frac{\partial}{\partial x} \left( \Gamma \frac{\partial \phi}{\partial x} \right) dx dt \quad (2.59)$$

En donde el orden de las integrales se escogió de acuerdo a la naturaleza del término, recordando que  $e, w$  son las caras del volumen de control. Para la representación del término  $\partial \phi / \partial t$ , se debe asumir que el valor de  $\phi$  en el nodo prevalece a través del volumen de control. Así, resolviendo el lado izquierdo de la Ecuación (2.59) obtenemos:

$$\lambda \int_w^e \int_t^{t+\Delta t} \frac{\partial T}{\partial t} dt dx = \lambda \Delta x (\phi_P^1 - \phi_P^0) \quad (2.60)$$

recordando que el flujo de difusión para  $x$  es:

$$J_x = -\Gamma \frac{\partial \phi}{\partial x} \quad (2.61)$$

Con esta consideración, se resuelve el lado derecho de la Ecuación (2.59), obteniendo:

$$\lambda \Delta x (\phi_P^1 - \phi_P^0) = \int_t^{t+\Delta t} \int_w^e (J_e - J_w) dt = \int_t^{t+\Delta t} \left[ \frac{\Gamma_e (\phi_E - \phi_P)}{(\delta x)_e} - \frac{\Gamma_w (\phi_P - \phi_W)}{(\delta x)_w} \right] dt \quad (2.62)$$

Hasta este punto, se necesita plantear un supuesto acerca de  $\phi_P, \phi_E$  y  $\phi_W$ , que varían con el tiempo desde  $t$  hasta  $t + \Delta t$ . Muchas suposiciones son posibles y algunas de ellas pueden ser generalizadas y, nuevamente se considera una interpolación lineal entre dos puntos de tiempo:

$$\int_t^{t+\Delta t} \phi_P dt = [f \phi_P^1 + (1 - f) \phi_P^0] \Delta t \quad (2.63)$$

donde  $f$  es el factor ponderado con valores entre 0 y 1 de la Ecuación (2.55). Usando fórmulas similares para las integrales de  $\phi_E$  y  $\phi_W$ , derivando desde la Ecuación (2.62):

$$\lambda \frac{\Delta x}{\Delta t} (\phi_P^1 - \phi_P^0) = f \left[ \frac{\Gamma_e(\phi_E^1 - \phi_P^1)}{(\delta x)_e} - \frac{\Gamma_w(\phi_P^1 - \phi_W^1)}{(\delta x)_w} \right] + (1 - f) \left[ \frac{\Gamma_e(\phi_E^0 - \phi_P^0)}{(\delta x)_e} - \frac{\Gamma_w(\phi_P^0 - \phi_W^0)}{(\delta x)_w} \right] \quad (2.64)$$

Arreglando esta ecuación, omitiendo el superíndice 1, y recordando que  $\phi_P, \phi_E$  y  $\phi_W$  serán considerados como los nuevos valores de  $\phi$  en el tiempo  $t + \Delta t$ , el resultado será:

$$\begin{aligned} a_P \phi_P &= a_E [f \phi_E + (1 - f) \phi_E^0] + a_W [f \phi_W + (1 - f) \phi_W^0] \\ &+ [a_P^0 - (1 - f) a_E - (1 - f) a_W] \phi_P^0 \end{aligned} \quad (2.65)$$

donde

$$a_E = \frac{\Gamma_e}{(\delta x)_e} \quad (2.66a)$$

$$a_W = \frac{\Gamma_w}{(\delta x)_w} \quad (2.66b)$$

$$a_P^0 = \frac{\lambda \Delta x}{\Delta t} \quad (2.66c)$$

$$a_P = f a_E + f a_W + a_P^0 \quad (2.66d)$$

Para ciertos valores específicos del factor ponderado  $f$ , la Ecuación (2.65) se reduce a un esquema determinado. Si  $f = 0$  el esquema se denomina explícito, para  $f = 0.5$  y  $f = 1$  los esquemas se denominan Crank-Nicolson e implícito, respectivamente.

El esquema explícito, esencialmente, asume que el valor anterior  $\phi_P^0$  prevalece a través del  $\Delta t$  total excepto en el punto  $t + \Delta t$ , donde cae abruptamente hacia  $\phi_P$ . Considerando este esquema, la Ecuación (2.65) llega a ser:

$$a_P \phi_P = a_E \phi_E^0 + a_W \phi_W^0 + (a_P^0 - a_E - a_W) \phi_P^0 \quad (2.67)$$

lo cual significa que  $\phi_P$  no está relacionada con otro “nuevo” valor  $\phi_E$  y  $\phi_W$ , pero se obtiene explícitamente en términos de  $\phi_E^0, \phi_W^0$  y  $\phi_P^0$  conocidas, de ahí que se denomina explícito. Este esquema se basa en la diferencia hacia atrás de la Ecuación (2.24), y la precisión del error de truncamiento de la serie de Taylor es de primer orden con respecto al tiempo [41]. Sin embargo, existe una limitación en referencia a la regla

básica acerca de los coeficientes positivos (regla 2), debido a que el coeficiente de  $\phi_p^0$  de la Ecuación (2.67) podría ser negativo. Para que  $a_p^0$  sea positivo,  $\Delta t$  tiene que ser lo suficientemente pequeño, debido a que aparece como denominador en la Ecuación (2.66c), de modo que  $a_p^0$  exceda a  $a_E + a_W$ . Para  $\Gamma$  y  $\Delta x = (\delta x)_e = (\delta x)_w$  uniforme, se expresa esta condición como:

$$\Delta t < \frac{\lambda(\Delta x)^2}{2\Gamma} \quad (2.68)$$

Esta ecuación es el criterio de estabilidad, el cual resultará un estado físicamente irreal si no se cumple, debido a que los coeficientes negativos implican que un valor más alto de  $\phi_p^0$  resulte lo opuesto para  $\phi_p$ . La condición de la Ecuación (2.68) implica que si se reduce  $\Delta x$  se mejora la precisión espacial, pero se obliga a utilizar un  $\Delta t$  más pequeño.

El esquema Crank-Nicolson asume una variación lineal de  $\phi_p^0$  a  $\phi_p$  en función de  $\Delta t$ , se formula con base en la diferencia central de la Ecuación (2.22), y la precisión del error de truncamiento de la serie de Taylor es de segundo orden con respecto al tiempo. Para  $f = 0.5$ , el coeficiente de  $\phi_p^0$  es  $a_p^0 - (a_E + a_W)/2$ ; nuevamente, para que  $a_p^0$  exceda a  $(a_E + a_W)/2$ , considerando  $\Gamma$  y  $\Delta x$  uniformes, se crea el siguiente criterio:

$$\Delta t < \frac{\lambda(\Delta x)^2}{\Gamma} \quad (2.69)$$

Siempre que  $\Delta t$  no sea lo suficientemente pequeño, el coeficiente puede llegar a ser negativo, dando resultados no reales; es por eso que este perfil es razonable en la representación de la relación  $\phi = f(t)$  para  $\Delta t$  pequeños.

En el esquema implícito, en el tiempo  $t$ ,  $\phi_p$  cae repentinamente desde  $\phi_p^0$  a  $\phi_p$  y permanece en  $\phi_p$  sobre el transcurso total de  $\Delta t$ . Con  $f = 1$ , la Ecuación (2.65) se convierte en:

$$a_p \phi_p = a_E \phi_E + a_W \phi_W + a_p^0 \phi_p^0 \quad (2.70)$$

en donde se asegura que el coeficiente de  $\phi_p^0$  no será negativo. Así, el esquema completamente implícito satisface los requerimientos de un comportamiento



satisfactorio del dominio físico. Sin embargo, se debe admitir que para  $\Delta t$  pequeños, este esquema no es exacto en comparación con el de Crank-Nicolson, y viceversa.

Además de considerar  $f = 1$  y el término de generación por unidad de volumen de la cantidad física relevante, la Ecuación (2.70) se representa como la ecuación discretizada en volumen finito, similar a las Ecuaciones (2.48) y (2.52a), en donde cambian algunos de los coeficientes:

$$a_P \phi_P = a_E \phi_E + a_W \phi_W + b \quad (2.71)$$

donde

$$a_E = \frac{\Gamma_e}{(\delta x)_e} \quad (2.72a)$$

$$a_W = \frac{\Gamma_w}{(\delta x)_w} \quad (2.72b)$$

$$a_P^0 = \frac{\lambda \Delta x}{\Delta t} \quad (2.72c)$$

$$b = S_c \Delta x + a_P^0 \phi_P^0 \quad (2.72d)$$

$$a_P = a_E + a_W + a_P^0 - S_P \Delta x \quad (2.72e)$$

### 2.3.3.1 Ecuación para dos y tres dimensiones

Para calcular el flujo ( $J_e$ ) en la cara del volumen de control entre los nodos, por ejemplo,  $P$  y  $E$ , se asume que dicho flujo así obtenido prevalece sobre la cara total ( $e$ ) de área transversal al sentido del flujo ( $\Delta y \cdot 1$ ), para el caso bidimensional; asumiendo esta consideración para las otras caras del volumen de control, la ecuación discretizada bidimensional se representa de la siguiente manera:

$$a_P \phi_P = a_E \phi_E + a_W \phi_W + a_N \phi_N + a_S \phi_S + b \quad (2.73)$$

$$a_E = \frac{\Gamma_e \Delta y}{(\delta x)_e} \quad (2.74a)$$

$$a_W = \frac{\Gamma_w \Delta y}{(\delta x)_w} \quad (2.74b)$$

$$a_N = \frac{\Gamma_n \Delta x}{(\delta y)_n} \quad (2.74c)$$

$$a_S = \frac{\Gamma_s \Delta x}{(\delta y)_s} \quad (2.74d)$$

$$a_P^0 = \frac{\lambda \Delta x \Delta y}{\Delta t} \quad (2.74e)$$

$$b = S_c \Delta x \Delta y + a_P^0 \phi_P^0 \quad (2.74f)$$

$$a_P = a_E + a_W + a_N + a_S + a_P^0 - S_P \Delta x \Delta y \quad (2.74g)$$

El producto  $\Delta x \cdot \Delta y \cdot 1$  es el volumen de control. Finalmente, se agregan dos vecinos más,  $T$  y  $B$  para representar la parte superior e inferior respectivamente en la dirección  $z$  y completar la configuración tridimensional de la Ecuación (2.15).

$$\lambda \frac{\partial \phi}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial x} \left( \Gamma \frac{\partial \phi}{\partial x} \right) + \frac{\partial}{\partial y} \left( \Gamma \frac{\partial \phi}{\partial y} \right) + \frac{\partial}{\partial z} \left( \Gamma \frac{\partial \phi}{\partial z} \right) + S$$

La discretización de esta ecuación queda de la siguiente manera:

$$a_P \phi_P = a_E \phi_E + a_W \phi_W + a_N \phi_N + a_S \phi_S + a_T \phi_T + a_B \phi_B + b \quad (2.75)$$

$$a_E = \frac{\Gamma_e \Delta y \Delta z}{(\delta x)_e} \quad (2.76a)$$

$$a_W = \frac{\Gamma_w \Delta y \Delta z}{(\delta x)_w} \quad (2.76b)$$

$$a_N = \frac{\Gamma_n \Delta z \Delta x}{(\delta y)_n} \quad (2.76c)$$

$$a_S = \frac{\Gamma_s \Delta z \Delta x}{(\delta y)_s} \quad (2.76d)$$

$$a_T = \frac{\Gamma_t \Delta x \Delta y}{(\delta z)_t} \quad (2.76e)$$

$$a_B = \frac{\Gamma_b \Delta x \Delta y}{(\delta z)_b} \quad (2.76f)$$

$$a_P^0 = \frac{\lambda \Delta x \Delta y \Delta z}{\Delta t} \quad (2.76g)$$

$$b = S_c \Delta x \Delta y \Delta z + a_p^0 \phi_p^0 \quad (2.76h)$$

$$a_p = a_E + a_W + a_N + a_S + a_T + a_B + a_p^0 - S_p \Delta x \Delta y \Delta z \quad (2.76i)$$

El significado físico de los coeficientes  $a_E, a_W, a_N, \dots, a_B$  representa la conductancia entre el punto  $P$  y los nodos vecinos correspondientes, y el término  $a_p^0 \phi_p^0$  es la energía interna (dividida por  $\Delta t$ ) contenida en el volumen de control al tiempo  $t$ . El término constante  $b$  consiste de esta energía interna y la velocidad de generación en el volumen de control, que resulta desde  $S_c$ . El coeficiente en el punto central  $a_p$  es la suma de todos los coeficientes vecinos (incluyendo  $a_p^0$ , el cual es el coeficiente del nodo vecino respecto del tiempo,  $\phi_p^0$ ) y contiene una contribución desde la linealización del término fuente [40].

### 2.3.3.1.1 Condiciones a la frontera

Tres tipos de condiciones a la frontera son comúnmente encontrados: 1) que se especifique el valor de  $\phi$ . 2) que se especifique el valor del flujo  $J_i$  (normal a la superficie de frontera) y, 3) que se indique la relación entre el flujo y el valor de  $\phi$  prescrito en la frontera. Para cada nodo cercano a la frontera, el correspondiente nodo en la frontera actúa como uno de sus vecinos. Por lo tanto, ya sea un valor o una ecuación, debe estar disponible para los valores de  $\phi$ , y esta consideración es utilizada para las cuatro fronteras del dominio de cálculo. Existen dos tipos de tratamiento: de orden inferior y superior. En el tratamiento de orden inferior se considera que el flujo total permanece constante entre dos nodos vecinos, como es representado por la Ecuación (2.61):

$$J_x = -\Gamma \frac{\partial \phi}{\partial x}$$

Sin embargo, se puede obtener una fórmula de orden superior si se considera el flujo de difusión como una representación lineal entre dos caras opuestas de un volumen de control. Así,  $J_2$  es el flujo que entra en la cara izquierda del volumen de control en la frontera izquierda, por ejemplo, y se distribuye linealmente hasta la salida  $J_3$  en la cara derecha del volumen de control. La distribución  $J$  asumida entre los nodos 1 y 2 para la dirección en  $x$  se representa por la ecuación:

$$J = -\Gamma \frac{\partial \phi}{\partial x} = J_2 + J'(\delta) \quad (2.77)$$

Se observa una ecuación lineal en donde  $J_2$  es la ordenada al origen,  $J'$  es la pendiente en el volumen de control,  $J' = (J_3 - J_2)/(2\delta)$ , y  $(\delta)$  es la distancia entre los nodos 1 y 2, en donde el nodo 2 coincide con el centro del volumen de control en donde se determina la cantidad  $\phi$ . La Ecuación (2.77) se integra con respecto a  $x$  para encontrar una expresión del perfil para  $\phi$ , y  $\Gamma$  se considera uniforme, aplicando las siguientes condiciones:

$$\text{En } \delta = 0: \quad \phi = \phi_1 \quad (2.78)$$

$$\text{y en } \delta = \delta: \quad \phi = \phi_2 \quad (2.79)$$

Con el uso de estas condiciones se llega a la siguiente ecuación generalizada para el flujo  $J_2$ :

$$J_2 = (\beta')[\Gamma_2(\phi_1 - \phi_2)/\delta] - (\beta' - 1)J_3 \quad (2.80)$$

donde  $\beta' = 4/3$  y, cuando  $\beta' = 1$ , la Ecuación (2.80) llega a ser la ecuación para el tratamiento de primer orden representado por la Ecuación (2.61). Para representar la ecuación de flujo en el nodo 1 se sustituye  $J_3$  en la Ecuación (2.80), recordando:

$$J_3 A_3 = D_3(\phi_2 - \phi_3) \quad (2.81)$$

donde  $A_3$  es el área transversal a la dirección del flujo y  $D_3$  es la conductancia de difusión entre los nodos  $\phi_2$  y  $\phi_3$ :

$$D_3 = A_3[(\delta_{e-}/\Gamma_2) + (\delta_{e+}/\Gamma_3)]^{-1} \quad (2.82)$$

De manera que la ecuación para el nodo 1 es:

$$J_{\phi_1} = (\beta')[\Gamma_2(\phi_1 - \phi_2)/\delta] - (\beta' - 1)[D_3(\phi_2 - \phi_3)/A_3] \quad (2.83)$$

En esta ecuación, los coeficientes  $a_W$  y  $a_E$  para el nodo 1 de la frontera izquierda son  $(\beta' - 1)D_3/A_3$  y  $(\beta')\Gamma_2/\delta$ , respectivamente. El uso del coeficiente  $a_W$  es inusual para el nodo 1, debido a que no existe un nodo vecino hacia atrás, por lo que este coeficiente no juega un papel propio.

El flujo para el nodo 2, es decir, al centro del volumen de control, y considerando que el flujo que permanece en dicho volumen de control es igual al flujo que entra menos el que sale, será:

$$J_{\phi_2} = [\beta' \Gamma_2 A_2 / \delta](\phi_1 - \phi_2) + [D_3 + (\beta' - 1)D_3 A_2 / A_3](\phi_3 - \phi_2) \quad (2.84)$$

El flujo de difusión en la frontera es de la forma:

$$J_B = f_C + f_P \phi_B \quad (2.85)$$

donde el subíndice  $B$  hace alusión a la frontera. El signo por convención en la Ecuación (2.85) para  $J_B$ , por ejemplo, para el caso de calor, será positivo cuando el calor es suministrado hacia el dominio, y negativo cuando hay una pérdida de calor desde el dominio. Cuando el flujo de difusión es completamente conocido,  $f_C$  representa ese valor conocido, y la pendiente  $f_P$  es igual a cero. Después, cuando dicho flujo de difusión es conocido como una función lineal de  $\phi_B$ , ambos  $f_C$  y  $f_P$  serán, en general, diferentes de cero. En un tercer caso, cuando el flujo es una función no lineal de  $\phi_B$ , la Ecuación (2.85) implica que  $f_C$  y  $f_P$ , por sí mismos, dependan de  $\phi_B$ , actualizándose en cada iteración.

Es importante señalar la similitud entre las Ecuaciones (2.85) y (2.51), en donde el flujo en la frontera  $J_B$  actúa como el término fuente  $\bar{S}$  para un volumen de control infinitesimal alrededor del nodo en la frontera. Mientras que  $S_C$  y  $S_P$  son calculados por unidad de volumen,  $f_C$  y  $f_P$  se especifican por unidad de área. Para un problema propiamente específico,  $f_P$  debe ser cero o negativo. Si el flujo de difusión en la frontera  $J_B$  es transmitido por un coeficiente, llámese de transferencia de calor por convección,  $h$ , (Ecuaciones (1.24) y (1.26)), o de velocidad de reacción superficial,  $\beta_N$ ,  $\beta_C$ , (Ecuaciones (1.12), (1.15) y (1.16)), tal que:

$$J_B = h(\phi_\infty - \phi_B), \quad J_B = \beta_N(\phi_\infty - \phi_B), \quad J_B = \beta_C(\phi_\infty - \phi_B)$$

donde  $\phi_\infty$  es la variable dependiente que representa la temperatura del fluido, o el potencial de nitrógeno o carbono de la atmósfera para el transporte de masa, y  $\phi_B$  es la variable dependiente de temperatura o concentración superficial.

Las expresiones para  $f_C$  y  $f_P$  son:

$$f_C = h\phi_\infty, \quad f_C = \beta_N\phi_\infty, \quad f_C = \beta_C\phi_\infty \quad (2.86)$$

$$f_P = -h, \quad f_P = -\beta_N, \quad f_P = -\beta_C \quad (2.87)$$

### 2.3.4 Solución de las ecuaciones algebraicas

Para resolver un sistema de ecuaciones algebraicas lineales se dispone de numerosos métodos, y se clasifican como directos o iterativos. Los métodos directos implican un número fijo predeterminado de operaciones aritméticas, y su uso es adecuado cuando el número de ecuaciones ( $\phi$  nodal desconocido) es pequeño. Sin embargo, estos métodos están sujetos a requerimientos excesivos de memoria y tiempo de computadora, y a menudo es más eficiente usar una técnica iterativa. Aunque no es posible predeterminar el número requerido de operaciones aritméticas, los métodos iterativos se caracterizan por requerimientos reducidos de cómputo y son especialmente apropiados cuando el número de ecuaciones es grande [35].

Un método directo empleado para la resolución de ecuaciones lineales es el denominado método de inversión de matrices, en el cual se considera un sistema de  $N$  ecuaciones algebraicas, generadas por algún método numérico, que corresponden a  $N$  variables dependientes desconocidas. Con la notación matricial, estas ecuaciones se expresan como:

$$[A][\phi] = [C] \quad (2.88)$$

donde

$$A \equiv \begin{bmatrix} a_{11} & a_{12} & \cdots & a_{1N} \\ \vdots & \ddots & \ddots & \vdots \\ a_{N1} & a_{N2} & \cdots & a_{NN} \end{bmatrix}, \quad \phi \equiv \begin{bmatrix} \phi_1 \\ \vdots \\ \phi_N \end{bmatrix}, \quad C \equiv \begin{bmatrix} C_1 \\ \vdots \\ C_N \end{bmatrix}$$

La matriz de coeficientes  $[A]$  es cuadrada de  $(N \times N)$ , y las matrices  $[\phi]$  y  $[C]$  son los vectores columna. Multiplicando la Ecuación (2.88) por el inverso de  $[A]^{-1}$  se obtiene el vector solución, y se conocen las variables dependientes, de acuerdo a la siguiente expresión [35]:

$$[\phi] = [A]^{-1}[C] \quad (2.89)$$

En el método de iteración de Gauss-Seidel los valores de la variable dependiente son calculados en cada nodo en un orden específico, si la ecuación de discretización es:

$$a_p \phi_p = \sum a_{nb} \phi_{nb} + b \quad (2.90)$$

donde el subíndice  $nb$  denota al nodo vecino. En el primer paso se despejan los valores de las incógnitas para cada nodo, que están en función del nodo vecino  $\phi_{nb}^*$ :

$$\phi_p = \frac{\sum a_{nb} \phi_{nb}^* + b}{a_p} \quad (2.91)$$

Para el primer nodo en la primera iteración en la estimación inicial de  $\phi$  se selecciona un valor de forma racional, para reducir el número de iteraciones que se requiere. En la Ecuación (2.91)  $\phi_{nb}^*$  permanece para los valores actuales de los nodos vecinos en el almacenamiento de la computadora. Para nodos vecinos, donde ya ha sido resuelto  $\phi$  durante la iteración actual,  $\phi_{nb}^*$  es el valor calculado recientemente, y para valores donde  $\phi$  no ha sido calculado en los nodos vecinos  $\phi_{nb}^*$  es el valor de la iteración previa. En cualquier caso,  $\phi_{nb}^*$  es el valor actualizado para la variable dependiente [40]. Se continúa con el procedimiento de iteración calculando valores nuevos o actuales de  $\phi_p$  respecto de la iteración previa, hasta que se satisface algún criterio de convergencia establecido:

$$\left( \frac{|\phi_{nb}^k - \phi_{nb}^{k-1}|}{\phi_{nb}^k} \right) 100 \% \leq \varepsilon \quad (2.92)$$

donde  $\varepsilon$  es el error relativo porcentual,  $\phi_{nb}^k$  es la aproximación actual y  $\phi_{nb}^{k-1}$  es la aproximación anterior [38].

Sin embargo, este método no siempre converge, así Scarborough (1958) formuló un criterio que cuando se cumple garantiza la convergencia. Una condición suficiente pero no necesaria para la convergencia es la que se enuncia en la siguiente expresión:

$$\frac{\sum |a_{nb}|}{|a_p|} \leq 1 \quad \text{para todas las ecuaciones} \quad (2.93a)$$

$$\frac{\sum |a_{nb}|}{|a_p|} < 1 \quad \text{para al menos una ecuación} \quad (2.93b)$$

Cabe mencionar que, aunque se viole el criterio, se puede obtener la convergencia, no siendo exclusivo del método de Gauss-Seidel, de modo que se asegura la convergencia en al menos un método iterativo. Se observa que algunas de las reglas enunciadas anteriormente, las cuales fueron formuladas de acuerdo a consideraciones físicas, cumplen con el criterio de Scarborough. Por ejemplo, la presencia del término  $S_p$  negativo dará una desigualdad  $\sum a_{nb}/a_p < 1$ . Por otro lado, si alguno de los coeficientes fuera negativo, después  $a_p$  (con frecuencia es igual a  $\sum a_{nb}$ ) pudiera tener una magnitud menor que  $\sum |a_{nb}|$  ( $\sum a_{nb} < \sum |a_{nb}|$ ), por lo cual no se cumpliría el criterio.

La mayor desventaja del método de Gauss-Seidel es que la convergencia es demasiado lenta, especialmente cuando se trabaja con un gran número de nodos. La razón de dicha lentitud se debe a que el método transmite la información de las condiciones de frontera a una velocidad de un intervalo en la malla por iteración.

En la solución iterativa de las ecuaciones algebraicas, o en el esquema empleado para manipular la no linealidad, con frecuencia se pueden acelerar o desacelerar los cambios de iteración a iteración en los valores de la variable dependiente; estos procesos de cambio son llamados sobrerelajación y bajorelajación, respectivamente. La bajorelajación es utilizada para problemas no lineales, empleándose con frecuencia para evitar la divergencia en la solución iterativa.

Para introducir estos términos aceleración-desaceleración se trabaja con la Ecuación de discretización (2.90)

$$a_p \phi_p = \sum a_{nb} \phi_{nb} + b$$

de la cual se despeja la variable dependiente

$$\phi_p = \frac{\sum a_{nb} \phi_{nb} + b}{a_p} \tag{2.94}$$

Si se agrega y resta, simultáneamente, el valor de  $\phi_p^*$  del lado derecho de la Ecuación (2.94), siendo este valor el resultado de  $\phi_p$  en la iteración previa:

$$\phi_p = \phi_p^* + \left( \frac{\sum a_{nb} \phi_{nb} + b}{a_p} - \phi_p^* \right) \tag{2.95}$$



donde el término entre paréntesis representa el cambio en  $\phi_p$  producido por la iteración actual, este cambio puede ser modificado por la introducción de un factor de relajación  $\alpha_r$ , de modo que

$$\phi_p = \phi_p^* + \alpha_r \left( \frac{\sum a_{nb} \phi_{nb} + b}{a_p} - \phi_p^* \right) \quad (2.96a)$$

o

$$\frac{a_p}{\alpha_r} \phi_p = (1 - \alpha_r) \frac{a_p}{\alpha_r} \phi_p^* + \sum a_{nb} \phi_{nb} + b \quad (2.96b)$$

Cuando las iteraciones convergen, es decir, cuando  $\phi_p$  es igual a  $\phi_p^*$ , la Ecuación (2.96a) implica que el valor de  $\phi$  satisface la Ecuación original (2.90). Cualquier esquema de relajación debe poseer esta propiedad. Cuando el factor de relajación  $\alpha_r$  en la Ecuación (2.85) está entre 0 y 1, su efecto es considerado como bajorelajación, es decir, los valores de  $\phi_p$  permanecen cercanos a  $\phi_p^*$ ; para un valor muy pequeño de  $\alpha_r$  los cambios en  $\phi_p$  llegan a ser muy lentos, y cuando  $\alpha_r$  es más grande de 1, se produce la sobrerrelajación y se adelanta la convergencia.

No existe una regla general para determinar el valor de  $\alpha_r$ , así el valor óptimo depende de varios factores, tales como: la naturaleza del problema, el número de nodos, el espaciamiento de la malla y el procedimiento iterativo utilizado. Otra particularidad es que este valor es flexible y puede ser cambiado de iteración a iteración.

Otra técnica de sobrerrelajación y bajorelajación es a través de la inercia manifestada por la Ecuación (2.90), en donde se agrega un término:

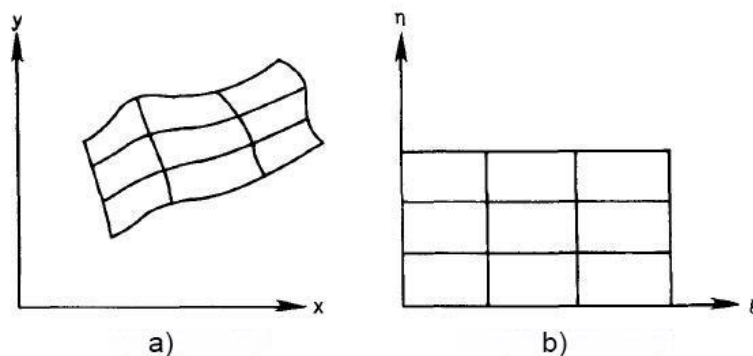
$$(a_p + i)\phi_p = \sum a_{nb} \phi_{nb} + b + i\phi_p^* \quad (2.97)$$

donde  $i$  es la inercia. Para valores positivos, la inercia tiene el efecto de bajorelajación, mientras que para valores negativos produce sobrerrelajación; nuevamente aquí no hay una regla general para encontrar un valor óptimo, y este debe ser determinado desde la experiencia sobre un problema particular. Algunas veces, la solución de un problema en estado estacionario se obtiene a través del uso de las ecuaciones de discretización para la situación en estado no estacionario, debido a que el término  $a_p^0 \phi_p^0$  de la

Ecuación (2.76h) actúa de la misma forma que el término  $i\phi_p^*$  de la Ecuación (2.97). Así, la inercia  $i$  es análoga al coeficiente  $a_p^0$  en la formulación no estacionaria [40].

### 2.3.5 Coordenadas ajustadas al cuerpo

Una geometría compleja puede ser modelada usando un sistema de coordenadas ajustadas al cuerpo (*BFC*, por sus siglas en inglés), conocido como coordenadas curvilíneas, en donde a través de las fronteras un eje de coordenadas permanece constante mientras que el otro eje coordenado varía. En general, la aplicación de un sistema BFC implica la evaluación de la transformación de coordenadas desde coordenadas predefinidas  $(x, y)$ , que pertenecen al dominio físico o real del sistema con geometría compleja, hacia un nuevo conjunto de coordenadas (ajustadas al cuerpo) que pertenecen al denominado dominio computacional u ortogonal  $(\xi, \eta)$ , como se aprecia en la Figura 2.6, en donde los ejes del dominio computacional están en función de los ejes del dominio físico en, por ejemplo, dos dimensiones. Así,  $\xi = \xi(x, y)$  y  $\eta = \eta(x, y)$ , o la transformación inversa  $x = x(\xi, \eta)$  y  $y = y(\xi, \eta)$ . La transformación debe proyectar al sistema  $(x, y)$  en una correspondencia uno a uno, o inyectiva, de lo contrario la transformación de un espacio a otro, y viceversa, no se puede realizar de manera única.



**Figura 2.6** Dominios: a) físico, y b) computacional [42].

Una vez que se conoce la correspondencia entre las coordenadas de los dominios físico y computacional, la ecuación diferencial parcial que gobierna el problema de transporte bajo consideración puede ser resuelta numéricamente por alguna técnica de discretización, tal como el método de diferencias finitas en el dominio computacional, debido a la simple forma rectangular que presenta, y a que las condiciones a la frontera

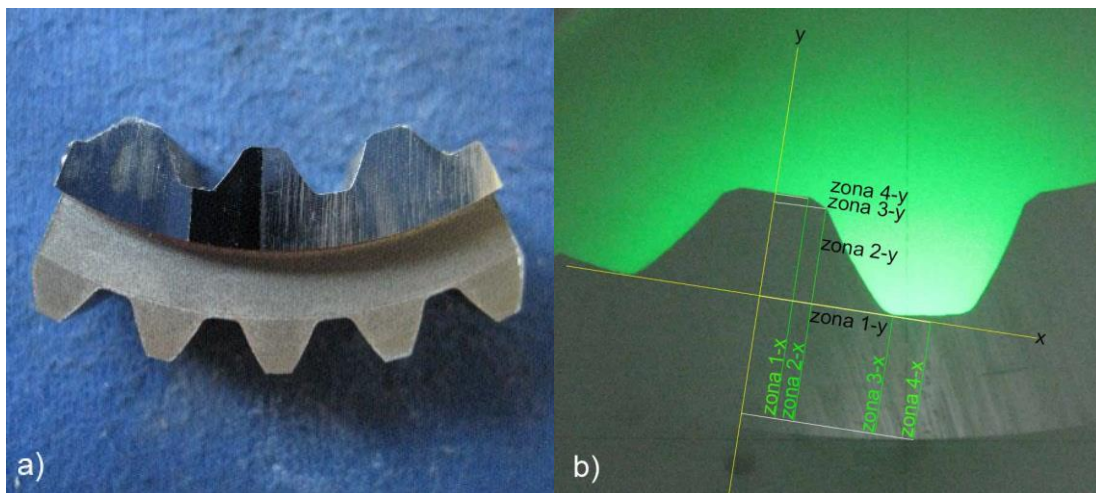
correspondientes pueden ser descritas con exactitud. La aplicación de las coordenadas ajustadas al cuerpo implica que las ecuaciones diferenciales parciales de transporte de cualquier escalar  $\phi$  continuo, sean transformadas desde el dominio físico  $(x, y)$  con la ayuda de la regla de la cadena para cambiar los ejes hacia el dominio computacional  $(\xi, \eta)$  [43].



### 3. METODOLOGÍA DE INVESTIGACIÓN

#### 3.1 SISTEMA DE ESTUDIO

El material utilizado para este estudio es un acero de bajo contenido de carbono con una designación de grado ETN-22, utilizado en la industria para la fabricación de engranes como el que se muestra en la Figura 3.1, el cual fue carburizado, templado en aceite y revenido. Debido a la simetría geométrica del engrane, se considera como dominio de cálculo la mitad de un diente (zona superior de la figura, resaltada con color negro) limitada por los diámetros interior (círculo del addendum), raíz del diente (círculo del dedendum) y el diámetro a la mitad de la pieza, que divide los dientes internos y externos de esta, los cuales son: 55.849 mm, 60.984 mm y 69.773 mm, respectivamente, medidos en un comparador óptico marca CCP, N/S CCP1401330, modelo CCP CC-14, con resolución de 0.001 mm ( $1\mu\text{m}$ ), con trazabilidad al Patrón Nacional de Longitud, el cual se encuentra en el Centro Nacional de Metrología (CENAM).



**Figura 3.1** a) Engrane de acero ETN-22, carburizado, templado en aceite y revenido, el cual muestra el dominio de cálculo (izquierda), y b) división por zonas en el comparador óptico (derecha).

#### 3.2 ECUACIONES DE TRANSPORTE

Las ecuaciones de transporte utilizadas para la simulación numérica por el método del volumen finito son:

### 3.2.1 Ecuación de conducción de calor

La ecuación de conducción de calor que gobierna el campo de temperatura  $T$  es:

$$\rho c \frac{\partial T}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial x} \left( k \frac{\partial T}{\partial x} \right) + \frac{\partial}{\partial y} \left( k \frac{\partial T}{\partial y} \right) + \frac{\partial}{\partial z} \left( k \frac{\partial T}{\partial z} \right) + S \quad (3.1)$$

donde  $\rho c$  es la capacidad de almacenamiento por volumen representada por la densidad  $\rho$  y el calor específico  $c$ ,  $T$  es la variable dependiente en función de las coordenadas  $x, y, z$ , que representa el campo escalar de temperatura,  $k$  es la conductividad térmica del material y  $S$  es la velocidad de generación de calor por unidad de volumen.

Se toman los valores de la densidad ( $\rho$ ), calor específico ( $c$ ) y conductividad térmica ( $k$ ) para el acero aleado al cromo-molibdeno 4130 (G41300), debido a la similitud que tiene en composición química con el acero utilizado en este estudio. Así, el valor para la densidad ( $\rho$ ) está en el rango de  $7.75 \times 10^6 \text{ g/m}^3$  a  $7.845 \times 10^6 \text{ g/m}^3$ , a temperatura ambiente, con un promedio de  $7.7975 \times 10^6 \text{ g/m}^3$  [44]. Este valor promedio es similar al valor de las fases  $\alpha$ -ferrita,  $\gamma$ -austenita y  $\delta$ -ferrita a temperaturas superiores, como se muestra en la Tabla 3.1, por lo que se consideró este valor promedio para los cálculos en la simulación, teniendo en cuenta que los tratamientos térmicos se llevan a cabo a las temperaturas de austenización de los aceros, y que en la mayoría de la literatura publicada se reporta la densidad como constante.

**Tabla 3.1** Densidad de las fases  $\alpha$ -ferrita,  $\gamma$ -austenita y  $\delta$ -ferrita a diferentes temperaturas [45].

Fase	Temperatura		Densidad ( $\text{g/m}^3$ )
	( $^{\circ}\text{C}$ )	( $^{\circ}\text{F}$ )	
$\alpha$ -ferrita	20	68	$7.870 \times 10^6$
$\alpha$ -ferrita	910	1670	$7.470 \times 10^6$
$\gamma$ -austenita	912	1673	$7.694 \times 10^6$
$\gamma$ -austenita	1390	2534	$7.660 \times 10^6$
$\delta$ -ferrita	1394	2541	$7.406 \times 10^6$

Asimismo, para el calor específico ( $c$ ) se reporta un valor promedio de  $825 \text{ J/kgK}$  para un rango de temperatura de  $650$  a  $700 \text{ }^{\circ}\text{C}$ , y de  $833 \text{ J/kgK}$  para uno de  $750$  a  $800 \text{ }^{\circ}\text{C}$ , en su condición de templado y revenido [44]. Considerando que son los puntos de temperatura más cercanos a los tratamientos térmicos llevados a cabo en el acero a

estudiar, se calcula la siguiente ecuación lineal para determinar el calor específico en función de la temperatura:

$$c(J/kgK = m^2/s^2°C) = 771 + 0.08T \quad (3.2)$$

donde  $T$  está en  $°C$  y la pendiente (0.08) en  $m^2/s^2°C^2$ .

La conductividad térmica ( $k$ ) es de  $31.0 W/mK$  a  $700 °C$  y de  $28.1 W/mK$  a  $1000 °C$  en su condición de templado y revenido [44]; nuevamente se toma este rango de temperaturas con el correspondiente comportamiento de la variable dependiente ( $k$ ) en esta zona. Así, se obtiene la ecuación lineal de la conductividad térmica en función de la temperatura:

$$k(gm/s^3 °C) = 37766.67 - 9.667T \quad (3.3)$$

donde  $T$  está en  $°C$  y la pendiente ( $-9.667$ ) en  $gm/s^3°C^2$ .

### 3.2.2 Ecuación de difusión (segunda ley de Fick)

La ecuación que gobierna la difusión de carbono se conoce como la segunda ley de Fick:

$$\frac{\partial C}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial x} \left( D \frac{\partial C}{\partial x} \right) + \frac{\partial}{\partial y} \left( D \frac{\partial C}{\partial y} \right) + \frac{\partial}{\partial z} \left( D \frac{\partial C}{\partial z} \right) \quad (3.4)$$

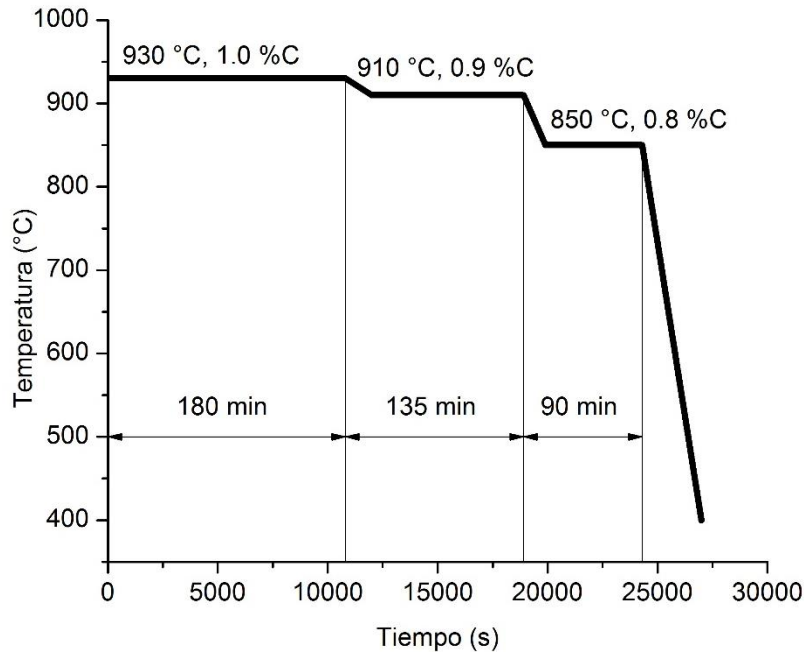
donde  $C$  es la concentración de carbono (% en masa o %wt.) y  $D$  es el coeficiente de difusión de carbono en austenita ( $m^2/s$ ) en función de la temperatura y de la concentración de los elementos aleantes. La Ecuación empírica (3.5), como señalan los autores [5], se derivó desde datos experimentales para aleaciones binarias hierro-carbono y aleaciones de varios elementos. Dicha ecuación se comparó con las otras ecuaciones listadas en la Tabla 1.1, obteniendo mejor predicción en cuanto a la difusividad de carbono en varios aceros aleados y perfiles de concentración de carbono en aceros carburizados, por lo que en esta simulación se utilizó dicha ecuación:

$$D(T, C) = [(0.146 - 0.036C(1 - 1.075Cr) - 0.0315Mn + 0.0509Si - 0.0085Ni + 0.3031Mo - 0.052Al) \exp \left( - \frac{144300 - 15000C + 370C^2 - 4366.3Mn + 4050.7Si - 1240.7Ni}{RT} \right)$$

$$\left. \frac{+7726Cr+12126.6Mo-6788.6Al}{T} \right] 1x10^{-4} \quad (3.5)$$

donde  $R = 8.314 \text{ J/Kmol}$  y  $T$  está en  $K$ .

El tratamiento termoquímico considerado se esquematiza en la Figura 3.2.



**Figura 3.2** Diagrama esquemático del tratamiento termoquímico de carburizado al que fue sometido el acero ETN-22 de este estudio.

Para la primera etapa del tratamiento termoquímico de carburizado, es decir, después del calentamiento, se implementan los primeros 4 ciclos de 45 minutos con un potencial de carbono de 1.0 % a 930 °C, como se muestra en la Figura 3.2, y el coeficiente de difusión  $D$  se consideró constante con un valor de  $9.96x10^{-12} \text{ m}^2/\text{s}$ , como resultado de la Ecuación (3.5), asumiendo el contenido de carbono inicial del acero; dicha consideración se debe a que en esta etapa la difusión de carbono se lleva a cabo desde la mezcla de gases de los hidrocarburos descompuestos térmicamente hacia la superficie del acero, a temperaturas relativamente superiores, comúnmente de 850 a 950 °C, en lugar de la difusión en austenita, en donde ya es válida la ecuación de la segunda ley de Fick. Así, también el potencial de carbono se ajusta para que sea lo más alto posible en esta etapa, teniendo en cuenta los límites de solubilidad de carbono en austenita sobre la superficie de la pieza, para evitar la formación de carburos y hollín, usualmente entre 0.8 y 1.3 %C.



Para la etapa de difusión, debido al gradiente de concentración entre la superficie y el núcleo del acero, el coeficiente de difusión  $D$  se consideró como una función de la temperatura y de la concentración, es decir, se calculó según la Ecuación (3.5). Dicha etapa comienza después de 180 minutos (10800 s) y termina a los 405 minutos (24300 s) de tratamiento termoquímico, en donde después de este tiempo ya no se calcula el coeficiente de difusión, debido a que se lleva a cabo la transformación de fase de austenita a martensita por el temple, la cual es considerada como una transformación sin difusión.

### 3.3 CONDICIONES INICIALES Y A LA FRONTERA

El primer acercamiento del dominio de cálculo con las condiciones exteriores a este es a través de sus fronteras, y es donde se recibe la información inicial al tiempo  $t = 0$  que será transmitida hacia los nodos internos. Como ya se mencionó, existen tres tipos de condiciones a la frontera que se encuentran en algún punto de esta: 1) especificando el valor de la variable dependiente (temperatura, masa), 2) conociendo el flujo que es normal a la superficie de frontera, o 3) determinando la relación entre el flujo y el valor de la variable dependiente en la frontera. Un buen método de cálculo codificado en un paquete computacional debe ser capaz de manipular todas las condiciones a la frontera para cada variable dependiente.

En el tratamiento termoquímico se trabaja por ciclos de 45 minutos en el horno: 1) la primera etapa después del calentamiento la pieza se mantuvo por 4 ciclos de 45 minutos con un potencial de carbono de 1.0 % a 930 °C, 2) la segunda etapa consistió en 3 ciclos de 45 minutos bajando el potencial de carbono para la difusión a 0.9 % a 910 °C, 3) la tercera etapa se llevó a cabo por un periodo de 2 ciclos de 45 minutos con un potencial de carbono de 0.8 % a 850 °C y, 4) por último, la pieza fue templada en un baño de aceite a 120 °C por un tiempo de agitación de 20 minutos, para posteriormente revenir a 208 °C por 120 minutos.

Generalmente, el coeficiente de difusión ( $D$ ) se determina por las condiciones a la frontera especificadas por la reacción a través de la capa superficial, y se expresa por la Ecuación (1.16):

$$D \frac{\partial C}{\partial x_i} n_i = J_B = \beta_c (C_w - C_s)$$

donde  $\beta_c$  es el coeficiente de transferencia de masa para el carbono, que define el flujo de átomos de carbono  $J$  desde la atmósfera hacia la superficie del acero, y que en esta simulación fue considerado como constante, con un valor de  $2.5 \times 10^{-7} \text{ m/s}$  [10],  $C_w$  es el potencial de carbono de la atmósfera y  $C_s$  es la concentración de carbono superficial.

Considerando la cinética del proceso, la velocidad de carburización máxima se obtiene cuando la transferencia de carbono de la atmósfera es igual o mayor que la velocidad de difusión en el acero, es decir, cuando  $\beta_c \geq D$ . Además, no hay deficiencia en cuanto al suministro de carbono en la interfaz, por lo que se asume que el contenido de carbono superficial es constante y se calcula en cada iteración.

Como ya se mencionó (Ecuación (2.85)), el flujo de difusión en la frontera es de la forma:

$$J_B = f_c + f_p C_s$$

donde  $C_s$  es el contenido de carbono en la frontera o superficie. Combinando las dos ecuaciones anteriores se obtiene:

$$J_B = \beta_c (C_w - C_s) = \beta_c C_w - \beta_c C_s = f_c + f_p C_s \quad (3.6)$$

donde

$$f_c = \beta_c C_w \quad (3.7a)$$

$$f_p = -\beta_c \quad (3.7b)$$

Para las etapas del proceso se consideraron los siguientes valores de  $f_c$  y  $f_p$ :

**Etapas 1** (< 180 minutos (10800 s))

$$f_c = (2.5 \times 10^{-7} \text{ m/s})(1.0) = 2.5 \times 10^{-7} \text{ m/s}; \quad f_p = -2.5 \times 10^{-7} \text{ m/s} \quad (3.8)$$

**Etapa 2** ( $\geq 180$  minutos (10800 s) < 315 minutos (18900 s))

$$f_c = (2.5 \times 10^{-7} \text{ m/s})(0.9) = 2.25 \times 10^{-7} \text{ m/s}; \quad f_p = -2.5 \times 10^{-7} \text{ m/s} \quad (3.9)$$

**Etapa 3** ( $\geq 315$  minutos (18900 s) < 405 minutos (24300s))

$$f_c = (2.5 \times 10^{-7} \text{ m/s})(0.8) = 2.0 \times 10^{-7} \text{ m/s}; \quad f_p = -2.5 \times 10^{-7} \text{ m/s} \quad (3.10)$$

Cabe señalar que estas condiciones solo aplican para las fronteras superior e inferior del dominio de cálculo, debido a que son las fronteras que están en contacto con la atmósfera gaseosa; en lo que respecta a las fronteras izquierda y derecha, son ejes de simetría donde se considera que el flujo es igual a cero.

En cuanto a la representación de la temperatura en las fronteras, la ecuación que la describe es la Ecuación (1.24)

$$k \frac{\partial T}{\partial x_i} n_i = J_B = h(T_\infty - T_s)$$

donde  $h$  es el coeficiente de transferencia de calor por convección ( $g/s^3^\circ C$ ) del horno en el tratamiento termoquímico de carburizado, y del aceite en el tratamiento térmico de temple,  $T_\infty$  es la temperatura del fluido, es decir de la atmósfera en el horno para el carburizado y la temperatura del medio de enfriamiento en el temple, que para este caso es el aceite, y  $T_s$  es la temperatura superficial de la pieza a carburizar.

Los coeficientes de transferencia de calor para los hornos de lecho fluidizado en el tratamiento termoquímico de carburizado son del orden de 400 a 740  $W/m^2K$  ( $4 \times 10^5 - 7.4 \times 10^5$ )  $g/s^3^\circ C$ , siendo uno de los mayores atributos en estos hornos la mayor velocidad en la cual el calor puede ser transferido desde el lecho de partículas (usualmente óxidos de aluminio o silicio) hacia la pieza inmersa [46]. Sin embargo, el acero utilizado en este estudio fue tratado termoquímicamente en un horno de convección natural, considerando como constante un valor del coeficiente de transferencia de calor por convección de  $3 \times 10^5$   $g/s^3^\circ C$  [5] para el ciclo de carburizado completo (405 minutos (24300 s)) previo al temple del acero.

Los coeficientes  $f_c$  y  $f_p$ , de acuerdo a la Ecuación (1.24), son:

$$f_c = hT_\infty \quad (3.11a)$$

$$f_p = -h \quad (3.11b)$$

donde  $h$  representa el coeficiente de transferencia de calor ( $g/s^3^\circ C$ ) para el horno en las fronteras superior e inferior del dominio de cálculo en las etapas:

**Etapas 1** ( $\geq 180$  minutos (10800 s) < 315 minutos (18900 s))

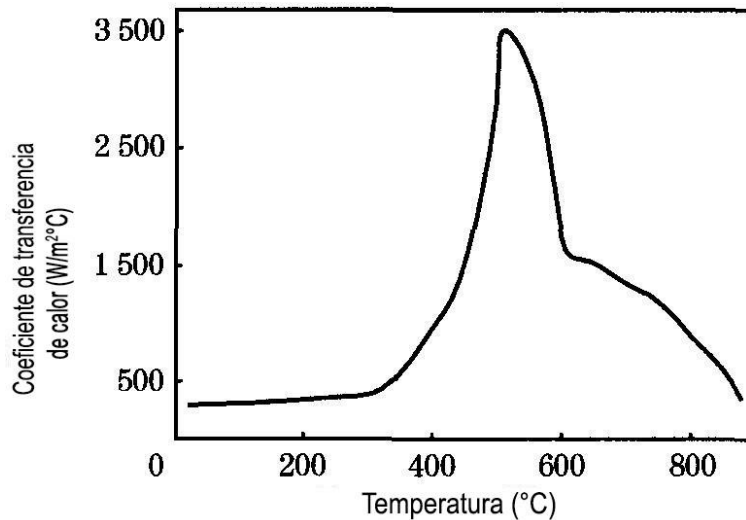
$$f_c = (3 \times 10^5 \text{ g/s}^3^\circ C)(910^\circ C) = 2.73 \times 10^8 \text{ g/s}^3; \quad f_p = -3 \times 10^5 \text{ g/s}^3^\circ C \quad (3.12)$$

en donde el enfriamiento empieza después de 180 minutos (10800 s), por lo que a partir de este punto se consideran los cálculos, es decir, el enfriamiento será de 930 a 910°C, tomando esta última temperatura como aquella a la que llegará el acero después de un tiempo  $t$ .

**Etapas 2** ( $\geq 315$  minutos (18900 s) < 405 minutos (24300 s))

$$f_c = (3 \times 10^5 \text{ g/s}^3^\circ C)(850^\circ C) = 2.55 \times 10^8 \text{ g/s}^3; \quad f_p = -3 \times 10^5 \text{ g/s}^3^\circ C \quad (3.13)$$

para esta etapa el enfriamiento será de 910 a 850 °C, previo al temple del acero. A su vez, el coeficiente de transferencia de calor por convección del medio de temple (aceite) fue considerado como aquel que se utilizó para la simulación numérica sobre un dominio de cálculo similar a este, y que se muestra la gráfica de la Figura 3.3 en función de la temperatura.



**Figura 3.3** Gráfica del coeficiente de transferencia de calor por convección del medio de temple [9].

De la gráfica del coeficiente de transferencia de calor por convección en función de la temperatura se digitalizó la curva, para conocer las variables dependiente e independiente,  $h$  y  $T$ , respectivamente. Sin embargo, debido a su forma, que difícilmente se ajusta a una sola ecuación que represente la transferencia de calor por convección, desde el carburizado hasta la temperatura del baño de temple (850 a 120°C), se consideró separarla en tres funciones durante el enfriamiento, con el mejor coeficiente de correlación en cada una de las zonas respecto de los pares ordenados  $h$  y  $T$ .

La primera función comprende el enfriamiento desde una temperatura de carburizado de 850 hasta 511°C, que es donde se encuentra el valor máximo de  $h$  en la Figura 3.4, la cual es un polinomio de tercer grado que solo es válido para este rango de temperatura:

$$h(g/s^3°C) = -0.1612T^3 + 360.49T^2 - 271721T + 7x10^7 \quad (3.14)$$

donde  $T$  está en °C.

La función que mejor se ajusta en la segunda zona es una del tipo exponencial, que comprende desde 511 hasta 314°C:

$$h(g/s^3°C) = 13747e^{0.0107T} \quad (3.15)$$

La última función comprende desde 314°C hasta la temperatura ambiente, considerando que en este rango se encuentra el medio de temple, es decir, el aceite a 120°C. Así, la ecuación que mejor se ajusta es una ecuación del tipo polinomio de segundo grado:

$$h(g/s^3°C) = 0.3244T^2 + 241.96T + 280965 \quad (3.16)$$

Las ecuaciones anteriores solo son válidas en el rango de temperaturas mencionado para cada una de ellas. Además, en cada rango se calculan los coeficientes  $f_p$  y  $f_c$ , que están en función de  $h$ , y este último, a su vez, es función de la temperatura del baño de aceite:

$$f_c = h(120^\circ C) = 120h(g/s^3); \quad f_p = -h(g/s^3°C) \quad (3.17)$$

en donde, nuevamente, estas ecuaciones solo se consideran en las fronteras superior e inferior del dominio de cálculo, y para las fronteras izquierda y derecha el valor de los coeficientes será  $f_c = 0$  y  $f_p = 0$ .

### 3.4 DISCRETIZACIÓN

La discretización en el dominio físico o real es simplemente impráctica para la mayoría de los problemas ingenieriles, debido, principalmente, a la precisión en la resolución de las derivadas parciales que gobiernan el problema de transporte en la frontera. Es decir, una frontera irregular implica un exceso de cálculos, por ejemplo en el flujo, debido a que este ocurre en la dirección del vector normal en cada punto de la frontera, y si esta es irregular conlleva una imprecisión. De lo anterior se desprende la importancia de hacer una transformación de dominios, del físico o real al computacional, en el que, debido a su característica de ser un dominio ortogonal o rectangular, la resolución de las derivadas parciales será con mayor precisión [47], por lo que es más fácil calcular las diferencias a través de ejes coordenados que se ajustan a la forma de la frontera.

Así, la ecuación diferencial parcial bajo consideración puede ser resuelta numéricamente por una técnica de discretización, tal como el método de las diferencias finitas en el dominio computacional. También, en este dominio las fronteras y sus

correspondientes condiciones se pueden describir con mayor precisión que en el dominio físico o real.

Debido a la geometría compleja del sistema bajo estudio (engrane), y con el objetivo de representar el dominio de cálculo físico o real, este se seccionó en 4 zonas en el eje  $x$  y 4 zonas en el eje  $y$ , que coinciden con los cambios de sección de la pieza mostrada en la Figura 3.4 b). Una vez que se fijó el origen  $(x, y) = (0, 0)$  a la mitad de un diente, se realizaron las mediciones en los ejes  $x$  y  $y$  para conseguir un conjunto de pares ordenados, y así obtener la representación de la variable  $y$  en función de  $x$  en una ecuación con el mejor ajuste sobre el perímetro de la pieza a analizar para cada zona del dominio de cálculo. La función  $y = f(x)$  implica la evaluación de la transformación del dominio físico o real de coordenadas  $x$  y  $y$  hacia un nuevo conjunto de coordenadas ajustadas al cuerpo, que pertenecen a un dominio computacional u ortogonal  $(\xi, \eta)$ , que se aprecia en la Figura 3.4, en donde se mantiene fijo el eje  $x$ , y el eje  $y$  es el que varía de acuerdo a la siguiente ecuación:

$$x = \xi \quad y = \eta \delta(x) \quad (3.18)$$

donde el eje  $y$  del dominio físico está en función de  $\eta$  del dominio computacional, que representa una fracción del total de la dimensión en dicho eje, y  $\delta(x)$  está en función de la posición  $x$ , calculada con el mejor ajuste de la colección de puntos medidos en un comparador óptico, como se mencionó anteriormente. Así, para las zonas de 1-x a 4-x representadas en la Figura 3.1 b) los valores de  $\delta(x)$  son los siguientes:

$$\delta(x)_{zona\ 1-x} = 0.00710 + 0.0432x \quad (3.19)$$

En esta ecuación lineal se observa que cuando  $x = 0\ m$ ,  $\delta(x) = 0.00710\ m$  y cuando  $x = 0.001018\ m$  (longitud de la zona 1-x),  $\delta(x) = 0.007144\ m$ , las cuales están representadas en la Figura 3.4 a) para el dominio físico en el eje  $y$ ; también se observa una pendiente positiva para esta zona, representada por la derivada:

$$\frac{d\delta}{dx} = 0.0432 \quad (3.20)$$

En cuanto a la zona 2-x del dominio de cálculo,  $\delta(x)$  está representada por la siguiente ecuación lineal:

$$\delta(x)_{zona\ 2-x} = 0.0076 - 0.4479x \quad (3.21)$$

la cual es válida para el intervalo de  $x = 0.001018\ m$  a  $x = 0.001632\ m$ , que al ser sustituidos en la Ecuación (3.21) arrojan la longitud para esta zona en  $y$ , como se aprecia en la Figura 3.4 a); además, se tiene una pendiente negativa en dicha zona, como lo muestra la siguiente derivada:

$$\frac{d\delta}{dx} = -0.4479 \quad (3.22)$$

Respecto de la zona 3-x del dominio de cálculo, la ecuación que mejor se ajusta es el siguiente polinomio de segundo grado:

$$\delta(x)_{zona\ 3-x} = 162.89x^2 - 2.174x + 0.01 \quad (3.23)$$

con pendiente:

$$\frac{d\delta}{dx} = 325.78x - 2.174 \quad (3.24)$$

que es válida para el intervalo  $x > 0.001632\ m$  a  $x = 0.004113\ m$ , en donde al sustituir estos valores se obtiene la extensión en el eje  $y$  para esta zona.

Por último, en la zona 4-x del dominio de cálculo el valor  $\delta(x)$  es una constante en el intervalo  $x = 0.004113\ m$  a  $x = 0.005326\ m$ :

$$\delta(x)_{zona\ 4-x} = 0.003814 \quad (3.25)$$

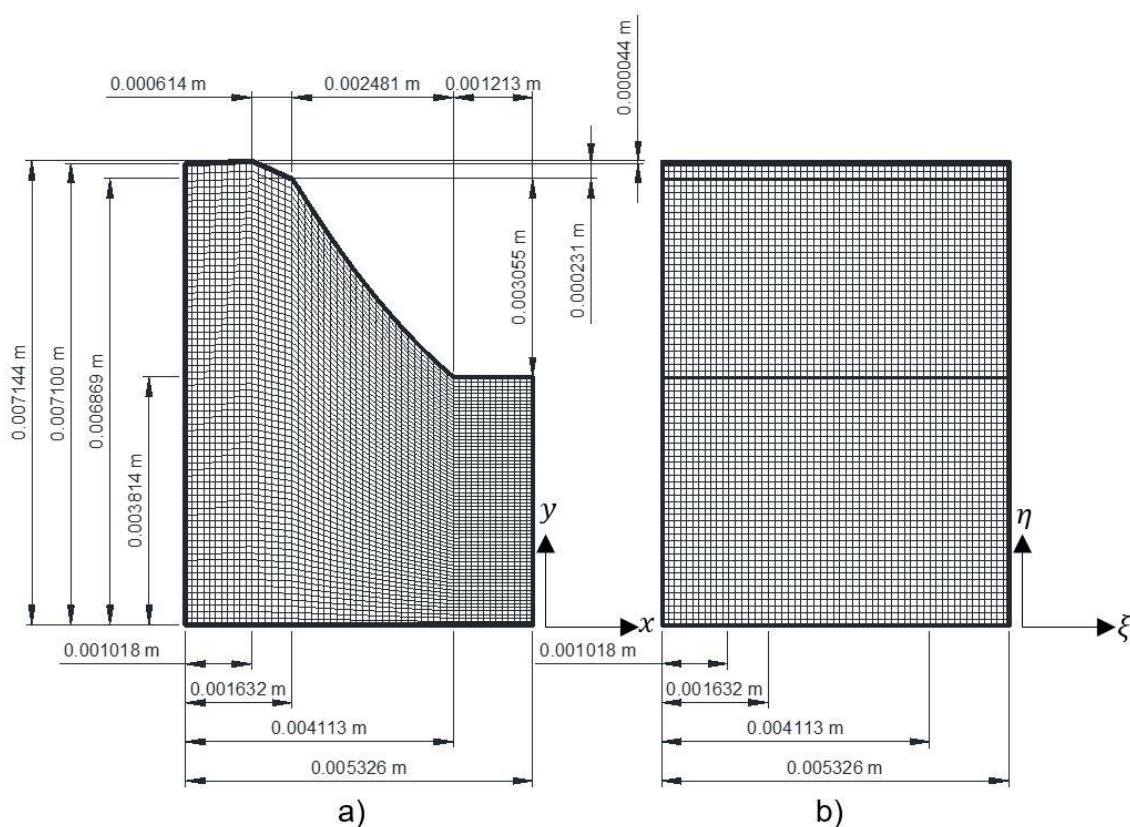
con pendiente:

$$\frac{d\delta}{dx} = 0 \quad (3.26)$$

En lo que respecta al eje  $\eta$  del dominio computacional, como ya se mencionó, representa una fracción del total en el dominio físico o real, es decir, para las zonas de la 1-y a la 4-y la fracción correspondiente es de  $0.003814\ m/0.007144\ m = 0.5339$ ,  $0.003055\ m/0.007144\ m = 0.4276$ ,  $0.000231\ m/0.007144\ m = 0.03234$  y  $0.000044\ m/0.007144\ m = 0.006160$ , respectivamente, las cuales, al sumarse, resultan en la unidad, y esta a su vez representa el total de la distancia en el eje  $y$  del dominio



físico. Ahora bien, la fracción de un volumen de control en  $\eta$  fue considerada para que representara una distancia similar a aquella en el eje  $x$  o  $\xi$ , de tal manera que se formara un cuadrado de aproximadamente  $0.0001\text{ m}$  por lado, con el objetivo de respetar el espaciamiento mínimo requerido de las indentaciones en la medición de dureza, considerando una distancia mínima de 2.5 veces la longitud de la diagonal de la indentación (para superficies carburizadas es del orden de  $36\ \mu\text{m}$ , y para la zona sin difusión de carbono es de aproximadamente  $51\ \mu\text{m}$ ) entre los centros de dos indentaciones adyacentes, y 2.5 veces la distancia del centro de una indentación al borde de la muestra.



**Figura 3.4** Representación de los volúmenes de control en el dominio de cálculo para la mitad de un diente carburizado en a) el dominio físico o real y b) el dominio computacional.

Para representar el dominio de cálculo con el método del volumen finito se transformaron los ejes del dominio físico al computacional, utilizando una malla de 4,161 ( $\xi = 57, \eta = 73$ ) nodos, considerando los correspondientes a la frontera, y 3,905 ( $\xi = 55, \eta = 71$ ) volúmenes de control, como se muestra en las imágenes de la Figura 3.4, en donde se aprecian las dimensiones para cada una de las zonas en el dominio

físico o real (izquierda) de la pieza a simular en los ejes  $x$  y  $y$ , y la correspondiente equivalencia en el dominio computacional u ortogonal (derecha).

Para hacer la transformación de dominios, la ecuación diferencial parcial general de transporte debe ser escrita en términos de  $(\xi, \eta)$  y discretizada en el dominio computacional:

$$\lambda \frac{\partial \phi}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial x} \left( \Gamma \frac{\partial \phi}{\partial x} \right) + \frac{\partial}{\partial y} \left( \Gamma \frac{\partial \phi}{\partial y} \right) = \Gamma \nabla^2 \phi \quad (3.27)$$

donde  $\nabla$  es el gradiente, o comúnmente llamado operador nabla, definido por:

$$\nabla = \frac{\partial}{\partial x} \mathbf{i} + \frac{\partial}{\partial y} \mathbf{j} \quad (3.28)$$

el cual está en función de los ejes coordenados del dominio físico  $x$  y  $y$ , y debido a que  $\xi = f(x, y)$  y  $\eta = f(x, y)$  se usa una de las reglas de la diferenciación más importantes, como es la regla de la cadena, para obtener los términos del operador en función de los ejes del dominio computacional:

$$\frac{\partial}{\partial x} = \frac{\partial}{\partial \xi} \frac{\partial \xi}{\partial x} + \frac{\partial}{\partial \eta} \frac{\partial \eta}{\partial x} \quad (3.29)$$

$$\frac{\partial}{\partial y} = \frac{\partial}{\partial \xi} \frac{\partial \xi}{\partial y} + \frac{\partial}{\partial \eta} \frac{\partial \eta}{\partial y} \quad (3.30)$$

y mediante las ecuaciones de transformación de coordenadas (Ecuación (3.18))  $x = \xi$  y  $y = \eta \delta(x)$  se obtienen todos los términos en función de los ejes computacionales  $\xi$  y  $\eta$ ; la discretización para el lado derecho de la Ecuación general de transporte (3.27) involucra el teorema de la divergencia. Al integrar la ecuación sobre el volumen de control este puede ser interpretado como área, la cual se puede integrar considerándola como una superficie cerrada de cuatro lados de acuerdo a las siguientes relaciones:

$$\int_V \lambda \frac{\partial \phi}{\partial t} dv = \int_V \Gamma \nabla^2 \phi dv = \int_V \Gamma \nabla \cdot \nabla \phi dv = \int_S \Gamma \nabla \phi \cdot \mathbf{dS} = \int_S \Gamma \nabla \phi \cdot \mathbf{n} dS \quad (3.31)$$

en donde  $\Gamma$  es la conductividad térmica para el transporte de calor y difusividad de carbono en austenita para el transporte de masa,  $\nabla \phi$  es el gradiente del campo escalar o vector direccional perpendicular a la superficie,  $\mathbf{n}$  es el vector normal y  $dS$  es el

diferencial de superficie. Así, una vez que se determinan las integrales en cada superficie del área, estas se suman de  $s_1$  a  $s_4$  de acuerdo a la siguiente expresión:

$$\int_s \Gamma \nabla \phi \cdot n \, dS = \int_{s_1} \Gamma \nabla \phi \cdot n \, dS + \int_{s_2} \Gamma \nabla \phi \cdot n \, dS + \int_{s_3} \Gamma \nabla \phi \cdot n \, dS + \int_{s_4} \Gamma \nabla \phi \cdot n \, dS \quad (3.32)$$

Resolviendo estas integrales y el lado izquierdo de la Ecuación (3.27) se obtiene una ecuación cuya resolución se lleva a cabo en un dominio ortogonal:

$$\lambda \left( \frac{\phi_P - \phi_P^0}{\Delta t} \right) \Delta \xi \Delta \eta = [\Gamma(\psi + \gamma)]_1 \Delta \eta - [\Gamma(\gamma + \psi)]_3 \Delta \eta + [\Gamma(\Lambda + \Omega)]_4 \Delta \xi - [\Gamma(\Omega + \Lambda)]_2 \Delta \xi \quad (3.33)$$

donde

$$\gamma = -\delta \frac{\partial \phi}{\partial \xi} \quad \Lambda = \beta \frac{\partial \phi}{\partial \xi} \quad \psi = \beta \frac{\partial \phi}{\partial \eta} \quad \Omega = -\frac{\alpha}{\delta} \frac{\partial \phi}{\partial \eta} \quad (3.34)$$

Esta nueva designación de términos presenta las derivadas parciales de la variable dependiente en función de los ejes coordenados  $\xi$  y  $\eta$ , en donde el grado de regularidad u ortogonalidad es alto, siendo así apropiado para utilizar diferencias centrales para su aproximación. Después de conocer las derivadas en algún nodo particular en función de los nodos vecinos, estas se sustituyen en la Ecuación principal (3.33), en donde se desglosan términos y se lleva a cabo una manipulación algebraica para obtener la Ecuación (2.73) discretizada para cada nodo.

$$a_P \phi_P = a_E \phi_E + a_W \phi_W + a_N \phi_N + a_S \phi_S + b$$

en donde ahora los nuevos coeficientes serán:

$$a_E = \left[ \frac{\Gamma_3 \delta_3}{\xi_E - \xi_P} \right] (\eta_2 - \eta_1) \quad (3.35a)$$

$$a_W = \left[ \frac{\Gamma_1 \delta_1}{\xi_P - \xi_W} \right] (\eta_2 - \eta_1) \quad (3.35b)$$

$$a_N = \left[ \frac{\Gamma_2 \alpha_2}{\delta_2 (\eta_N - \eta_P)} \right] (\xi_2 - \xi_1) \quad (3.35c)$$

$$a_S = \left[ \frac{\Gamma_4 \alpha_4}{\delta_4 (\eta_P - \eta_S)} \right] (\xi_2 - \xi_1) \quad (3.35d)$$

$$a_p = a_N + a_S + a_E + a_W + a_p^0 \quad (3.35e)$$

$$a_p^0 = \frac{\lambda}{\Delta t} \Delta \xi \delta \Delta \eta \quad (3.35f)$$

en donde

$$\alpha = \beta^2 + 1 \quad (3.36)$$

y

$$\beta = \eta \frac{\partial \delta}{\partial \xi} \quad (3.37)$$

El desglose matemático detallado para la discretización del dominio físico al computacional se describe en el Apéndice A.

### 3.5 IMPLEMENTACIÓN COMPUTACIONAL

Una vez que se obtienen las ecuaciones de transporte discretizadas empleando el método numérico del volumen finito para el dominio computacional, se implementan las ecuaciones algebraicas resultantes en un lenguaje de programación. Para esta investigación se partió del código computacional denominado **CONDUCT** (acrónimo de “heat **CON**duction and **DUCT** flow”) [34] utilizado para el análisis de la fluidinámica y la transferencia de calor en ductos, del cual sus principales capacidades son:

- Calcula la distribución de cualquier cantidad escalar, tal como temperatura y concentración, entre otras, que son gobernadas por una ecuación diferencial parcial.
- El código se utiliza para condiciones en estado estacionario y no estacionario.
- Contempla tres sistemas de coordenadas: 1) cartesianas  $(x, y)$ , 2) simétricas al eje o cilíndricas  $(x, r)$  y 3) polares o esféricas  $(\theta, r)$ .
- Es útil para problemas con diferentes condiciones a la frontera.

Sin embargo, CONDUCT tiene una limitante que da origen a la realización de este estudio: el código no es apropiado para dominios no ortogonales, siendo estos dominios los utilizados mayormente en el tratamiento termoquímico de carburizado y temple, por lo que es necesario adaptar las ecuaciones algebraicas para que superen esta

limitante. Las principales modificaciones se dan en los coeficientes de la ecuación discretizada para dos dimensiones:

$$a_P \phi_P = a_E \phi_E + a_W \phi_W + a_N \phi_N + a_S \phi_S + b$$

La columna izquierda de la Tabla 3.2 muestra los coeficientes como originalmente los presenta CONDUCT (Ecuaciones (2.74a) a (2.74d)) para un sistema ortogonal, y su columna derecha muestra la modificación a estos coeficientes para un sistema no ortogonal (Ecuaciones (3.35a) a (3.35d)).

**Tabla 3.2** Coeficientes de CONDUCT para un dominio ortogonal (columna izquierda) y modificación de estos para un dominio no ortogonal (columna derecha).

<b>Coeficientes CONDUCT (dominio ortogonal)</b>	<b>Modificación (dominio no ortogonal)</b>
$a_E = \left[ \frac{\Gamma_3}{\bar{\xi}_E - \bar{\xi}_P} \right] (\eta_2 - \eta_1)$	$a_E = \left[ \frac{\Gamma_3 \delta_3}{\bar{\xi}_E - \bar{\xi}_P} \right] (\eta_2 - \eta_1)$
$a_W = \left[ \frac{\Gamma_1}{\bar{\xi}_P - \bar{\xi}_W} \right] (\eta_2 - \eta_1)$	$a_W = \left[ \frac{\Gamma_1 \delta_1}{\bar{\xi}_P - \bar{\xi}_W} \right] (\eta_2 - \eta_1)$
$a_N = \left[ \frac{\Gamma_2}{(\eta_N - \eta_P)} \right] (\xi_2 - \xi_1)$	$a_N = \left[ \frac{\Gamma_2 \alpha_2}{\delta_2 (\eta_N - \eta_P)} \right] (\xi_2 - \xi_1)$
$a_S = \left[ \frac{\Gamma_4}{(\eta_P - \eta_S)} \right] (\xi_2 - \xi_1)$	$a_S = \left[ \frac{\Gamma_4 \alpha_4}{\delta_4 (\eta_P - \eta_S)} \right] (\xi_2 - \xi_1)$

Para las caras paralelas  $s_1$  y  $s_3$  del volumen de control, y sus coeficientes  $a_W$  y  $a_E$ , respectivamente, el elemento de área superficial  $ds = dy$  y  $y = \eta\delta$ . Dado que se considera  $\delta$  como constante y  $\eta$  variable para estas caras, se tiene que  $ds = \delta d\eta$ , es decir, sólo estará variando  $\eta$  a lo largo del eje  $y$  y  $\delta$  aparece en el numerador de los coeficientes para las caras  $s_1$  y  $s_3$ . Por otro lado, en las caras  $s_2$  y  $s_4$  del volumen de control, y sus coeficientes  $a_N$  y  $a_S$ , respectivamente,  $y = \eta d\delta$ , por lo que se considera el eje coordenado  $\eta$  como constante, mientras que  $\delta$  estará variando horizontalmente en dichas caras debido a que está en función de  $x$ , representando solo una fracción del

total de  $\delta$  en el eje  $y$ , apareciendo así en el denominador de los coeficientes; adicionalmente, para estas caras aparece el término  $\alpha$  en el numerador, que de acuerdo a la Ecuación (3.36) está en función de  $\beta$ :

$$\alpha = \beta^2 + 1$$

en donde  $\beta = \eta \partial\delta/\partial\xi$  (Ecuación (3.37)), que representa el grado de inclinación en las caras horizontales  $s_2$  y  $s_4$  (debido a  $\eta$ ) de la pendiente en  $\delta$  en función de la distancia  $x$ . Así, cuando  $\eta = 0$  la pendiente será también igual a cero y, por lo tanto,  $\alpha = 1$ . La Ecuación (3.36) se asemeja a la identidad trigonométrica:

$$\sec^2\theta = \tan^2\theta + 1 \tag{3.38}$$

en donde  $\alpha = \sec^2\theta$  debido a la relación que hay entre la pendiente, es decir, la hipotenusa si se considera un triángulo rectángulo, y la base de este, que es la distancia en el eje  $\xi$  de un volumen de control. Así, cuando  $\eta = 0$  coinciden ambas distancias (hipotenusa y base), por lo que  $\sec^2\theta = 1$ , y el ángulo será igual a cero, y conforme  $\eta$  se aproxime a la unidad incrementará la pendiente y el ángulo. Por otro lado,  $\beta^2 = \tan^2\theta$  debido a la relación que se tiene entre la distancia en  $\eta$  a través del eje  $y$  respecto de la base del volumen de control en el eje  $\xi$ . Nuevamente, si se considera un triángulo rectángulo de catetos opuesto y adyacente,  $\eta$  y  $\xi$ , respectivamente, cuando  $\eta = 0$  no existe relación entre dichos catetos y, por lo tanto,  $\beta^2$  y la pendiente serán igual a cero.

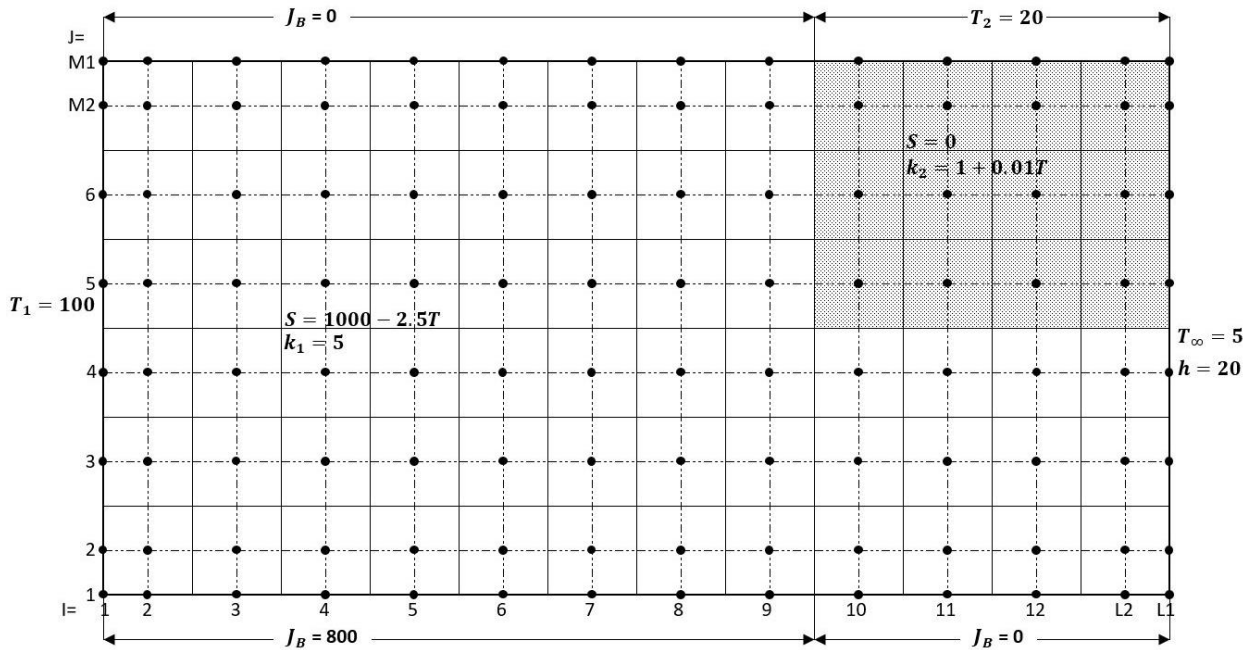
### 3.6 VALIDACIONES

Para confirmar la veracidad de los resultados, debido a la implementación de los coeficientes modificados para representar un dominio no ortogonal en el código CONDUCT, se evaluaron varios casos presentados en la literatura, así como también otros experimentales.

#### 3.6.1 Literatura

Como validación inicial se reprodujo un problema tipo para un sistema de coordenadas ortogonales descrito en el manual del usuario de CONDUCT. El problema fue diseñado

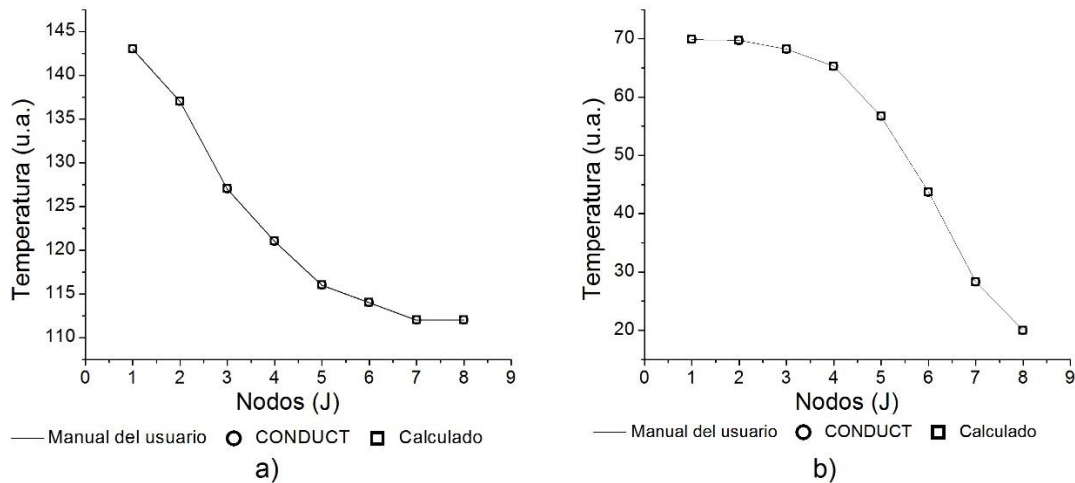
para ilustrar la conducción de calor en estado estacionario con diferentes condiciones a la frontera, además de considerar conductividades térmicas ( $k$ ) y razones de generación de calor por volumen ( $S$ ) tanto constantes como dependientes de la temperatura. La situación física se muestra en la Figura 3.5, en donde se observa una malla uniforme tal que los dominios de ciertas propiedades del material coincidan con las caras de los volúmenes de control.



**Figura 3.5** Representación de un problema tipo para un sistema en coordenadas ortogonales.

Para este problema se tienen 3 condiciones a la frontera distintas. La primera condición corresponde a una situación en que la superficie se mantiene a una temperatura fija ( $T$ ), la cual se denomina, normalmente, como condición de Dirichlet, o condición de frontera de primera clase, y se aplica en la frontera izquierda ( $T_1 = 100$ ) y en la parte superior derecha ( $T_2 = 20$ ) del dominio de cálculo. La segunda condición corresponde a la existencia de un flujo de calor fijo o constante ( $J_B$ ) en la superficie. Esta se denomina condición de Neumann, o condición de frontera de segunda clase, teniendo un valor de  $J_B = 800$  para la frontera inferior izquierda. Un caso especial de esta condición corresponde a una superficie perfectamente aislada, o adiabática, en donde el flujo de calor es igual a cero, es decir  $J_B = 0$ , para las fronteras inferior derecha y superior izquierda. La condición de frontera de tercera clase corresponde a la representada en la frontera derecha, en donde existe ya sea calentamiento o enfriamiento por convección,

y se obtiene de un balance de energía (Ecuación (1.24)). Para esta frontera la temperatura del fluido circundante es  $T_\infty = 5$  y el coeficiente de transferencia de calor por convección  $h = 20$ . Ahora bien, respecto del interior del plano sólido se tiene un área con generación de calor en función de la temperatura  $S = 1000 - 2.5T$  y una conductividad térmica del material constante  $k_1 = 5$ . Por otro lado, se tiene un área sombreada (esquina superior derecha) sin generación de calor  $S = 0$  y una conductividad térmica en función de la temperatura  $k_2 = 1 + 0.01T$ . La Figura 3.6 muestra los resultados reportados por el manual del usuario de CONDUCT, los resultados obtenidos empleando CONDUCT y los obtenidos después de la modificación para representar dominios no ortogonales (“Calculado”), obteniéndose resultados idénticos.



**Figura 3.6** Gráficas de temperatura en función de la posición de los nodos a)  $l=4$  y b)  $l=12$ .

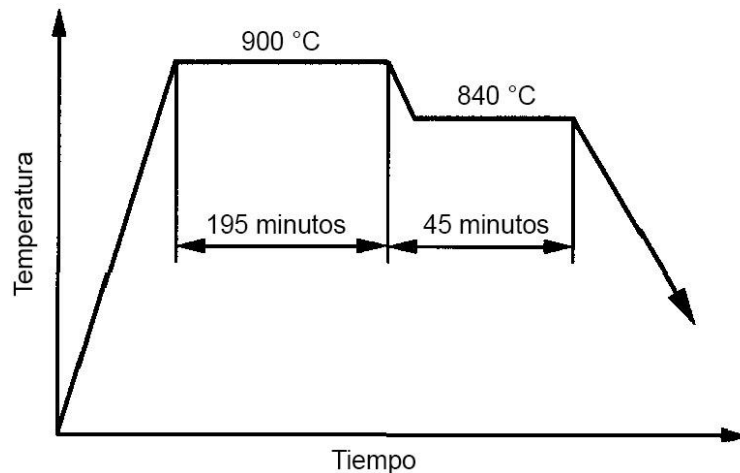
Para esta figura se grafican las temperaturas en los nodos desde  $J=1$  a  $J=M1$  (ver Figura 3.5) en función de las posiciones nodales  $l=4$  e  $l=12$ .

Por otra parte, se reprodujeron 4 casos de tratamiento termoquímico de carburizado publicados en la literatura [2,3,5,9], de los cuales se hicieron algunas suposiciones debido a la falta de información en dichas publicaciones. Para los tres primeros [2,3,5] se utiliza el mismo acero, tipo AISI 5120, y dimensiones similares en el dominio de cálculo. Sin embargo, en los dos primeros [2,3] no se especifica el punto de medición y se considera aquel utilizado en [5], debido a que en este se valida experimentalmente su modelo con lo reportado en [2,3].



### 3.6.1.1 Artículo: Experimental measurements and numerical simulation of stress and microstructure in carburized 5120 steel disks [2]

Se reprodujo un tratamiento en dos etapas, como se muestra en la Figura 3.7. La primera etapa corresponde al carburizado a una temperatura de 900°C, con un potencial de carbono de 0.85 %, por 195 minutos. La segunda etapa corresponde a la difusión de carbono a una temperatura de 840°C por 45 minutos. Sin embargo, los autores no reportaron el potencial de carbono para esta etapa, por lo que se considera un valor igual a 0.80 %, debido a que los resultados experimentales de esta publicación sirven como validación de una subrutina para simular el proceso de carburizado, basada en el método del elemento finito, nombrada CTDT (Carburization and Thermal Distortion with Transformation kinetics), en la cual los autores [5] supusieron esta concentración de carbono superficial, la cual, además, es utilizada en su mayoría para esta etapa.



**Figura 3.7** Proceso de tratamiento térmico en dos etapas: carburizado (a 900 °C) y difusión (a 840 °C).

La pieza tratada consiste de una sección cilíndrica de 30 mm de diámetro y 10 mm de espesor de un acero 5120, del cual la Tabla 3.3 muestra su composición química.

**Tabla 3.3** Análisis químico del acero 5120 antes del tratamiento de carburizado [2].

Elemento	C	Cr	Mn	Si	Ni	Mo	Al
Concentración (% wt.)	0.23	0.80	0.83	0.22	0.15	0.04	0.031

Debido a que en la simulación del carburizado los autores no señalan los valores de la difusividad de carbono en el acero,  $D$ , y considerando nuevamente la validación de la subrutina CTDT en donde se utiliza la Ecuación empírica (3.2):

$$D(T, C) = [(0.146 - 0.036C(1 - 1.075Cr) - 0.0315Mn + 0.0509Si - 0.0085Ni + 0.3031Mo - 0.052Al) \exp\left(-\frac{144300 - 15000C + 370C^2 - 4366.3Mn + 4050.7Si - 1240.7Ni + 7726Cr + 12126.6Mo - 6788.6Al}{RT}\right)] 1 \times 10^{-4}$$

donde  $R = 8.314 J/molK$  y  $T$  es la temperatura en  $K$ , se considera también esta ecuación para los cálculos y se obtienen entonces los valores de  $D(a\ 900\ ^\circ C\ y\ 0.23\ \%wt) = 5.17 \times 10^{-6} mm^2/s$  para la etapa de carburizado de 195 minutos (11700 s), y de  $D(a\ 840\ ^\circ C\ y\ 0.23\ \%wt) = 2.33 \times 10^{-6} mm^2/s$  para la etapa de difusión de 45 minutos (2700 s).

Respecto del coeficiente de transferencia de masa para el carbono,  $\beta_c$  (Ecuación (1.16)), y debido a que la publicación nuevamente no lo indica, este se consideró como constante, con un valor de  $2.5 \times 10^{-7} m/s$  [10]. Asimismo, el flujo en la frontera fue representado por la Ecuación (2.85):

$$J_B = f_c + f_p C_s$$

donde, de acuerdo a las Ecuaciones (3.7a) y (3.7 b), los coeficientes son  $f_c = \beta_c C_w$  y  $f_p = -\beta_c$ , que al sustituirse en las dos etapas se obtiene:

**Etapas 1** ( $< 195$  minutos (11700 s))

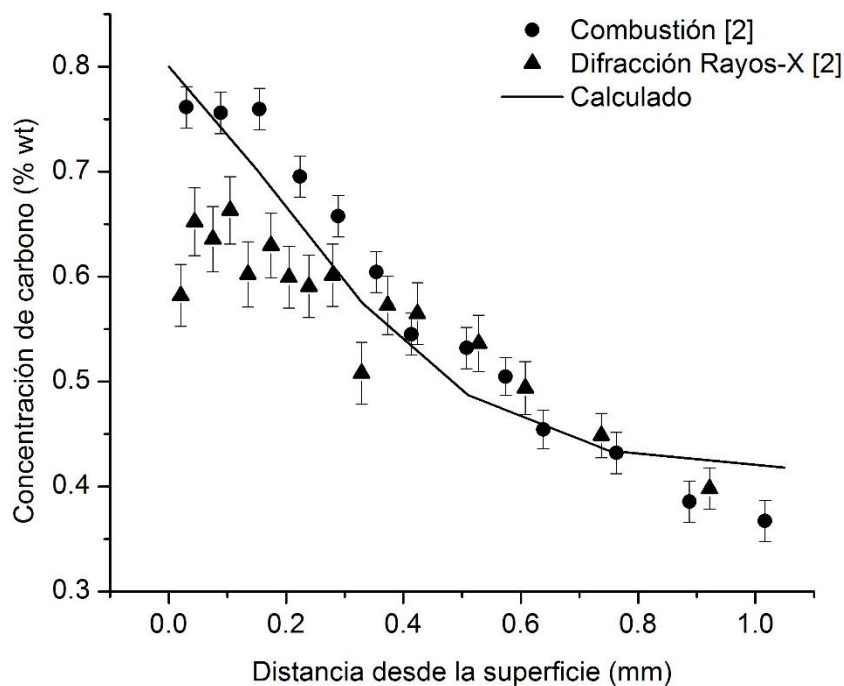
$$f_c = (2.5 \times 10^{-7} m/s)(0.85) = 2.125 \times 10^{-7} m/s; \quad f_p = -2.5 \times 10^{-7} m/s$$

**Etapas 2** ( $\geq 195$  minutos (11700 s))

$$f_c = (2.5 \times 10^{-7} m/s)(0.80) = 2.0 \times 10^{-7} m/s; \quad f_p = -2.5 \times 10^{-7} m/s$$

El dominio de cálculo consistió en un rectángulo de 30 mm de longitud y 10 mm de ancho, el cual presentó un mallado más fino en la superficie para que representara mejor la capa carburizada. La comparación de los resultados experimentales,

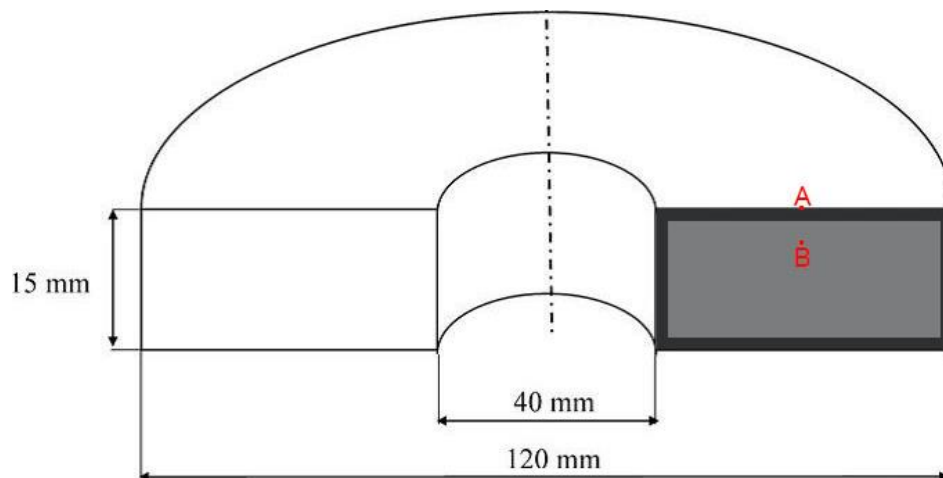
reportados por los autores de la publicación, y los calculados en el presente estudio se muestran en la Figura 3.8, en donde se grafica la concentración de carbono en función de la distancia desde la superficie; la concentración fue medida experimentalmente por dos técnicas: la de combustión, que es ampliamente utilizada para determinar el contenido de carbono, con una resolución de aproximadamente 50  $\mu\text{m}$  de profundidad, y la de difracción de Rayos-X con el método Rietveld, el cual proporciona un estimado del contenido de carbono en función de sus efectos sobre la razón de los parámetros de red  $c/a$ . La diferencia más notable entre los datos experimentales se presenta en la región más cercana a la superficie (0 – 0.4 mm), que podría estar asociada a la decarburización, como lo refieren los autores [2]. Sin embargo, existe buena concordancia entre la curva calculada y la medida experimentalmente por combustión.



**Figura 3.8** Determinación del contenido de carbono en función de la distancia por combustión [2], difracción de Rayos-X [2] y calculados.

### 3.6.1.2 Artículo: Simulation of the influence of carbon profile and dimensions on distortion behaviour of SAE 5120 discs by using a design of experiment [3]

Los datos experimentales de esta publicación se usaron para validar la subrutina CTD T [5]. Para este caso solo se consideró la etapa de carburizado, a una temperatura de 940°C, con un potencial de carbono de 0.8 % por 120 minutos. El perfil de carbono fue medido sobre un disco de un acero SAE 5120, carburizado en medio gaseoso, con una concentración inicial de carbono de 0.16 %, obtenido de la digitalización de las gráficas experimentales a una distancia donde se considera que no hay gradiente de concentración de carbono (1.5 mm), es decir, en esta distancia se representa el contenido de carbono inicial del material antes del tratamiento. El disco tiene un diámetro exterior e interior de 120 y 40 mm, respectivamente, y un espesor de 15 mm, de tal manera que haciendo un corte transversal se obtiene una sección rectangular de 40 mm de ancho por 15 mm de espesor, como la que se muestra en la Figura 3.9.



**Figura 3.9** Corte transversal de la pieza carburizada, mostrando el dominio de cálculo (sección rectangular derecha) donde se realizó la simulación [3].

Ahora bien, en lo referente a la difusividad de carbono en el acero,  $D$ , los autores la consideraron como constante durante la simulación, con un valor de  $2.4 \times 10^{-5} \text{ mm}^2/\text{s}$  a 940°C.

Nuevamente, debido a que los autores no mencionan el valor del coeficiente de transferencia de masa para el carbono,  $\beta_c$  (Ecuación (1.16)), este fue considerado como

constante, con un valor de  $2.5 \times 10^{-7} \text{ m/s}$  [10]. Así, la Ecuación (2.85) para el flujo de difusión en la frontera, en la etapa de carburizado, queda de la siguiente manera:

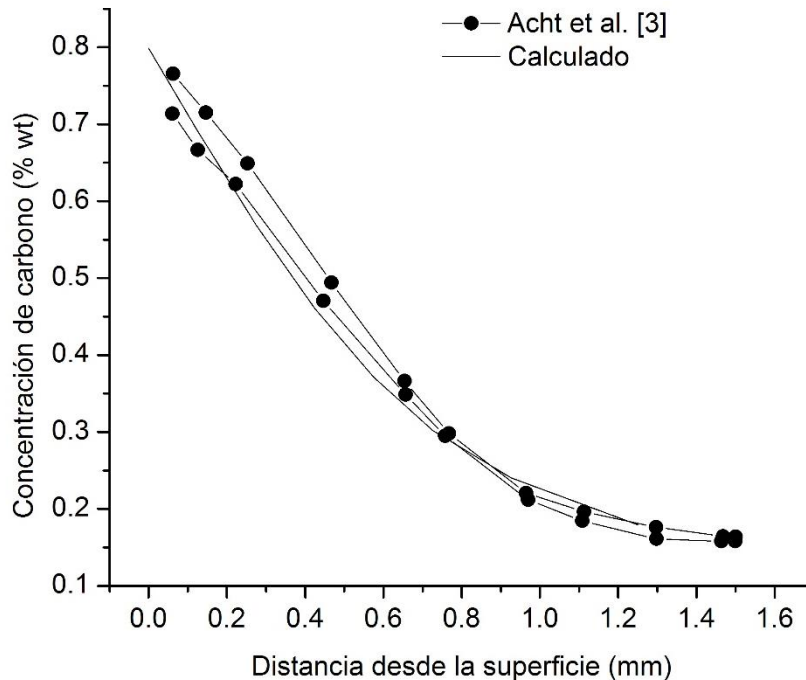
$$J_B = f_C + f_P C_s$$

donde, de acuerdo a las Ecuaciones (3.7a) y (3.7 b), los coeficientes son  $f_C = \beta_c C_w$  y  $f_P = -\beta_c$ , que al sustituirse se obtiene:

**Etapa 1** ( $\leq 120 \text{ minutos}(7200 \text{ s})$ )

$$f_C = (2.5 \times 10^{-7} \text{ m/s})(0.8) = 2.0 \times 10^{-7} \text{ m/s}; \quad f_P = -2.5 \times 10^{-7} \text{ m/s}$$

Para la simulación del proceso de carburizado el mallado fue más fino en las superficies de la pieza, para que representara mejor el gradiente de carbono. La Figura 3.10 muestra la concentración de carbono en función de la distancia desde la superficie de la pieza, obtenida experimentalmente por espectroscopia de emisión óptica (donde los autores no mencionan el punto de ensayo), y los resultados calculados se realizaron en el centro de la sección rectangular del punto A al punto B de la Figura 3.9.



**Figura 3.10** Comparación de los perfiles de carbono experimental [3] y calculado.

### 3.6.1.3 Artículo: Comparison of two finite element simulation codes used to model the carburizing of steel [5]

Para esta validación se compararon los datos calculados con la simulación de la subrutina CTDT desarrollada por Lee et al. [5], para simular el proceso de carburizado en aceros tratados térmicamente, y que, a su vez, validaron con la subrutina comercial para tratamiento térmico denominada DANTE, considerando las mismas condiciones de proceso y geometría de la pieza a tratar.

El tratamiento se llevó a cabo en dos etapas: la primera corresponde al carburizado a una temperatura de 900°C, con un potencial de carbono de 0.8 %, por 180 minutos. La segunda etapa corresponde a la difusión, en la cual los autores asumieron un potencial de carbono de 0.8 %, y no reportan la temperatura y el tiempo para esta etapa, por lo que se consideraron los mismos con los que validaron experimentalmente sus resultados [2], es decir, 840°C y 75 minutos.

La pieza tratada consiste en un cilindro de acero AISI 5120 de 30 mm de longitud por 10 mm de diámetro, del cual la Tabla 3.4 muestra la composición química, de acuerdo a la base de datos de cada subrutina (CTDT y DANTE).

Tabla 3.4 Composición química del acero AISI 5120.

Subrutina	Elemento (%)						
	C	Cr	Mn	Si	Ni	Mo	Al
CTDT	0.21	1.25	0.89	0.24	0.00	0.00	<0.03
DANTE	0.23	0.80	0.83	0.22	0.15	0.04	---

Respecto de la difusividad de carbono en el acero,  $D$ , de acuerdo a los autores las ecuaciones empíricas son más eficientes para los cálculos en la práctica que los modelos basados en termodinámica. La Tabla 1.1 muestra estas ecuaciones, en donde la difusividad de carbono en austenita está en función de la concentración de los aleantes y de la temperatura. Experimentalmente se ha encontrado que la difusividad de carbono disminuye con el incremento en la concentración de este, mientras que aumenta a temperaturas de carburizado superiores, por lo que para los cálculos de difusividad se utilizó la Ecuación empírica (3.2) que aparece al final de la Tabla 1.1 [5]:

$$D(T, C) = [(0.146 - 0.036C(1 - 1.075Cr) - 0.0315Mn + 0.0509Si - 0.0085Ni + 0.3031Mo - 0.052Al) \exp \left( - \frac{144300 - 15000C + 370C^2 - 4366.3Mn + 4050.7Si - 1240.7Ni + 7726Cr + 12126.6Mo - 6788.6Al}{RT} \right)] 1x10^{-4}$$

debido a que esta ecuación es obtenida a partir de datos experimentales de sistemas hierro-carbono y aleaciones con varios elementos, además de ser comparada con las demás ecuaciones de la Tabla 1.1, en donde mostró las mejores predicciones de difusividad de carbono para capas carburizadas. Así, para las etapas de carburizado y difusión se obtienen los siguientes valores, considerando la concentración de elementos en la base de datos de cada subrutina:

- Carburizado

$$D_{CTDT}(a\ 900\ ^\circ C\ y\ 0.21\ ^\circ C) = 3.50x10^{-6}\ mm^2/s$$

$$D_{DANTE}(a\ 900\ ^\circ C\ y\ 0.23\ ^\circ C) = 5.17x10^{-6}\ mm^2/s$$

- Difusión

$$D_{CTDT}(a\ 840\ ^\circ C\ y\ 0.21\ ^\circ C) = 1.54x10^{-6}\ mm^2/s$$

$$D_{DANTE}(a\ 840\ ^\circ C\ y\ 0.23\ ^\circ C) = 2.33x10^{-6}\ mm^2/s$$

El coeficiente de transferencia de masa para el carbono,  $\beta_c$  (Ecuación (1.16)), debido a que los autores no lo indican, fue considerado como constante, con un valor de  $2.5x10^{-7}\ m/s$  [10], quedando la Ecuación (2.85) para el flujo de difusión en la frontera de las dos etapas (carburizado y difusión) de la siguiente manera:

$$J_B = f_c + f_p C_s$$

donde, de acuerdo a las Ecuaciones (3.7a) y (3.7 b), los coeficientes son  $f_c = \beta_c C_w$  y  $f_p = -\beta_c$ , que al sustituirse en las dos etapas se obtiene:

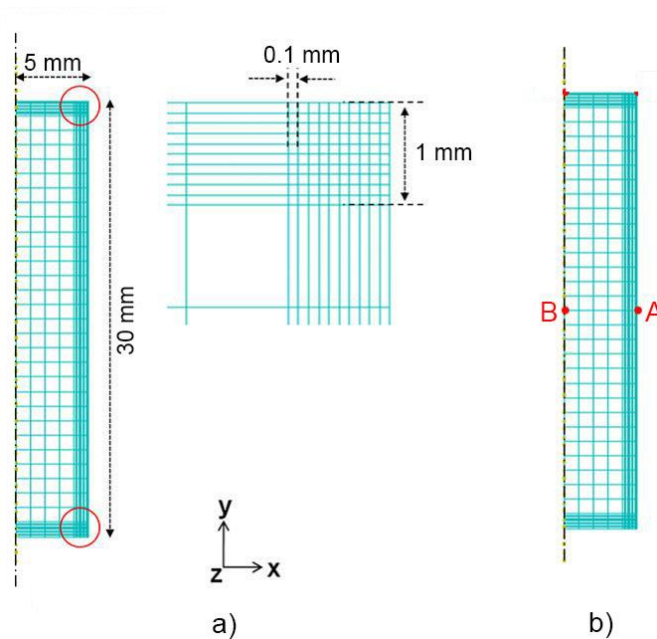
**Etapas 1** ( $\leq 180\ minutos(10800\ s)$ )

$$f_c = (2.5 \times 10^{-7} \text{ m/s})(0.8) = 2.0 \times 10^{-7} \text{ m/s}; \quad f_p = -2.5 \times 10^{-7} \text{ m/s}$$

**Etapla 2** ( $> 180$  minutos(10800 s))

$$f_c = (2.5 \times 10^{-7} \text{ m/s})(0.8) = 2.0 \times 10^{-7} \text{ m/s}; \quad f_p = -2.5 \times 10^{-7} \text{ m/s}$$

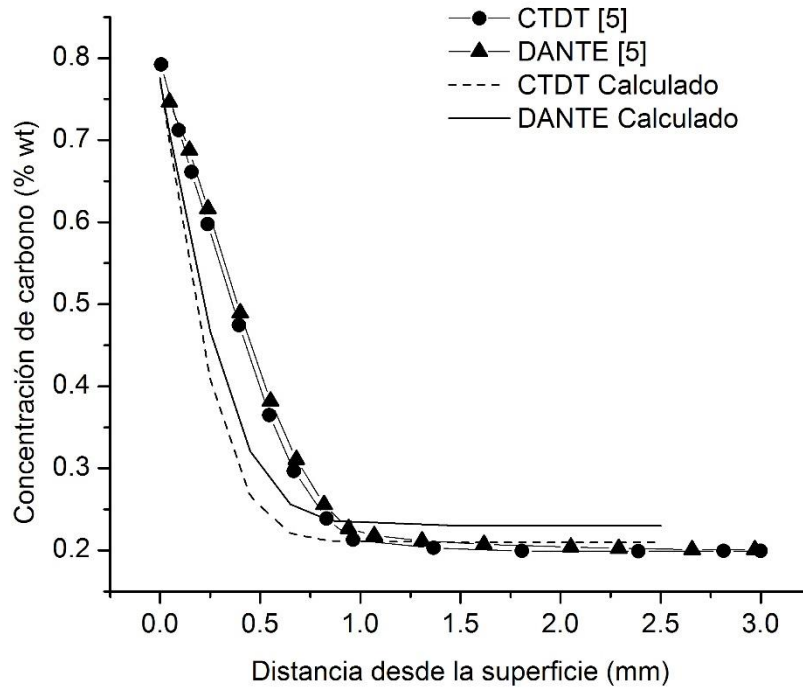
El dominio de cálculo sobre el cilindro se observa en la Figura 3.11, en donde, por simetría, solo se considera la mitad para la simulación, quedando una sección rectangular de 30 mm de longitud por 5 mm de ancho, similar a la de la Figura 3.9, la cual se utilizó para la validación experimental del código CTDT. El mallado para la simulación numérica tiene cuadrados de 1 mm de lado en el interior del dominio de cálculo, y una malla más fina con cuadrados de 0.1 mm por lado para la capa carburizada en la superficie.



**Figura 3.11** a) Dominio de cálculo de la pieza cilíndrica con mallado fino en los bordes y b) ubicación del perfil de carbono de A a B.

Bajo estas condiciones, los resultados obtenidos de los cálculos son graficados y comparados con aquellos obtenidos por los autores con las subrutinas CTDT y DANTE, y se muestran en la Figura 3.12.

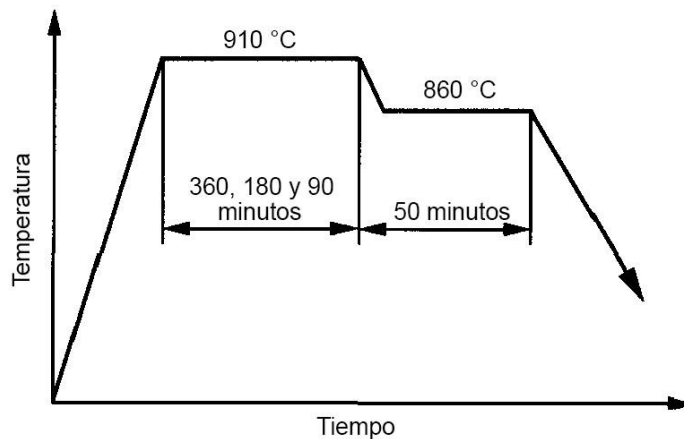




**Figura 3.12** Comparación de los perfiles de carbono obtenidos por las subrutinas CTD T [5], DANTE [5] y los calculados.

#### 3.6.1.4 Artículo: Numerical simulation on carburizing and quenching of gear ring [9]

Se reprodujo un tratamiento en dos etapas, como se muestra en la Figura 3.13. La primera etapa corresponde al carburizado a una temperatura de 910°C, con un potencial de carbono de 1 %, por 360, 180 y 90 minutos. La segunda etapa corresponde a la difusión de carbono a una temperatura de 860°C, con un potencial de carbono de 0.8 % por 50 minutos en un horno continuo.



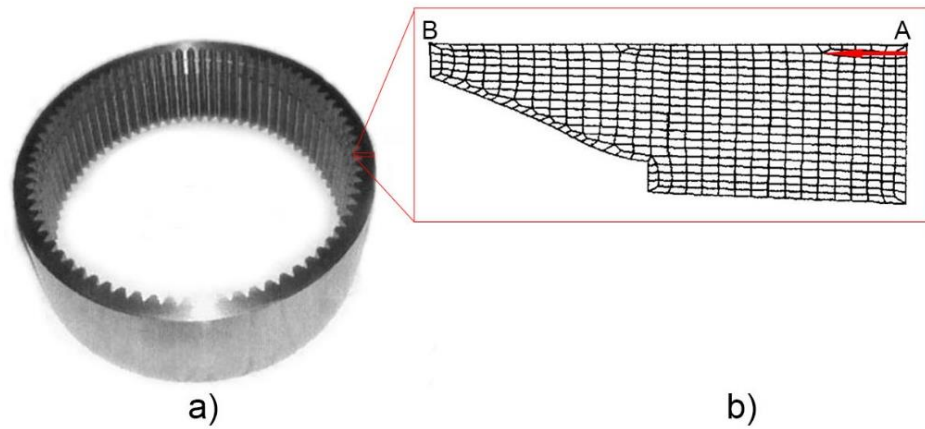
**Figura 3.13** Proceso de carburizado para tres diferentes tiempos 360, 180 y 90 minutos, con un tiempo de difusión de 50 minutos [9].

La pieza tratada consiste de un anillo dentado de acero 22CrMoH, como el que se muestra en la Figura 3.14 a), con un contenido inicial de carbono de 0.21 %, teniendo un módulo de 3.1 mm y 74 dientes. Los diámetros en la punta y base de los dientes son de 226.40 y 241.79 mm, respectivamente, y el diámetro del exterior de la pieza es de 260 mm, por lo que se obtiene una distancia de 16.8 mm de A a B (Figura 3.14 b)). Debido a que el anillo dentado es suficientemente ancho (93 mm), los autores realizaron todos los cálculos sobre una posición a la mitad de la altura. Por consiguiente, el modelo en dos dimensiones representa solo 1/148 del anillo dentado, es decir, la mitad de un diente, debido a la geometría simétrica (Figura 3.14 b)).

Durante la simulación del carburizado los autores consideraron la difusividad de carbono en el acero,  $D$ , como un valor constante igual a  $1.32 \times 10^{-5} \text{ mm}^2/\text{s}$  a  $910^\circ\text{C}$ . Sin embargo, no reportaron la difusividad para la temperatura de  $860^\circ\text{C}$ , por lo que se consideró como constante, y se utilizó la Ecuación (3.39) para la difusividad de carbono en austenita (de la Tabla 1.1), la cual es empírica, debido a que dicha ecuación presentó la mejor aproximación para la difusividad a  $910^\circ\text{C}$  ( $1.39 \times 10^{-5} \text{ mm}^2/\text{s}$ ):

$$D(T) = 0.0077 \exp\left(-\frac{107400}{RT}\right) \quad (3.39)$$

donde  $R = 8.314 \text{ J/molK}$  y  $T$  es la temperatura en  $K$ , de la cual se obtiene un valor de  $8.62 \times 10^{-6} \text{ mm}^2/\text{s}$  a  $860^\circ\text{C}$ .



**Figura 3.14** a) Anillo dentado y b) mallado de elemento finito de la mitad de un diente [9].

El coeficiente de transferencia de masa para el carbono,  $\beta_c$  (Ecuación (1.16)), fue considerado como constante, con un valor de  $2.5 \times 10^{-7} \text{ m/s}$  [10], debido a que la publicación no lo indica, quedando la Ecuación (2.85) para el flujo de difusión en la frontera de las dos etapas (carburizado y difusión) de la siguiente manera:

$$J_B = f_c + f_p C_s$$

donde, de acuerdo a las Ecuaciones (3.7a) y (3.7 b), los coeficientes son  $f_c = \beta_c C_w$  y  $f_p = -\beta_c$ , que al sustituirse en las dos etapas se obtiene:

**Etapa 1** ( $\leq 90 \text{ minutos}(5400 \text{ s})$  o  $180 \text{ minutos}(10800 \text{ s})$  o  $360 \text{ minutos}(21600 \text{ s})$ )

$$f_c = (2.5 \times 10^{-7} \text{ m/s})(1.0) = 2.5 \times 10^{-7} \text{ m/s}; \quad f_p = -2.5 \times 10^{-7} \text{ m/s}$$

**Etapa 2** ( $> 90 \text{ minutos}(5400 \text{ s})$  o  $180 \text{ minutos}(10800 \text{ s})$  o  $360 \text{ minutos}(21600 \text{ s})$ )

$$f_c = (2.5 \times 10^{-7} \text{ m/s})(0.8) = 2.0 \times 10^{-7} \text{ m/s}; \quad f_p = -2.5 \times 10^{-7} \text{ m/s}$$

Las comparaciones de los resultados publicados por Song et al. [9] y los calculados en el presente estudio se muestran en las Figuras 3.15 a 3.17, en donde se observan las curvas del contenido de carbono en función de la distancia desde la superficie en la dirección de A a B de la Figura 3.14 b), para los tiempos de carburizado de 360, 180 y 90 minutos, respectivamente, manteniendo el tiempo de difusión constante para los tres casos (50 minutos).

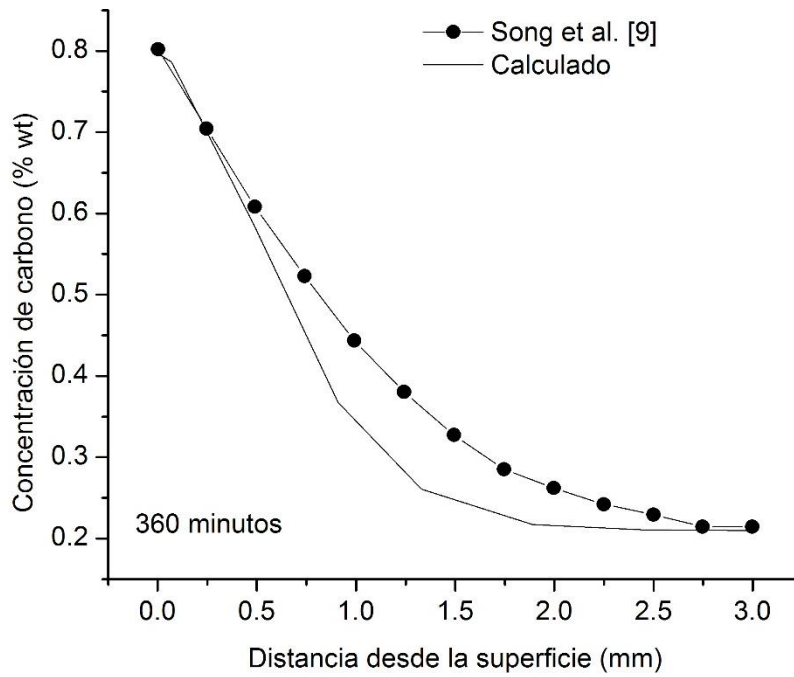


Figura 3.15 Distribución del contenido de carbono en la simulación del carburizado para 360 minutos.

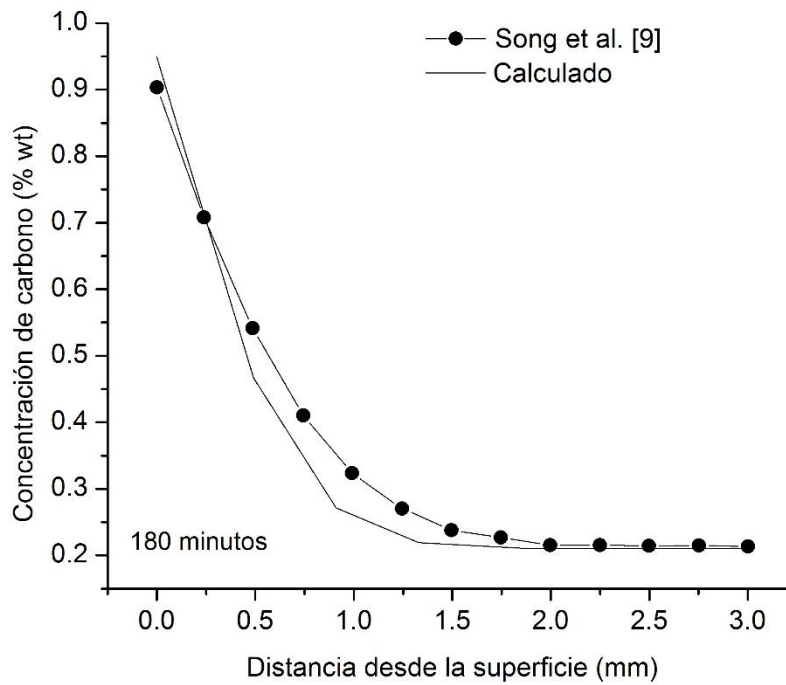
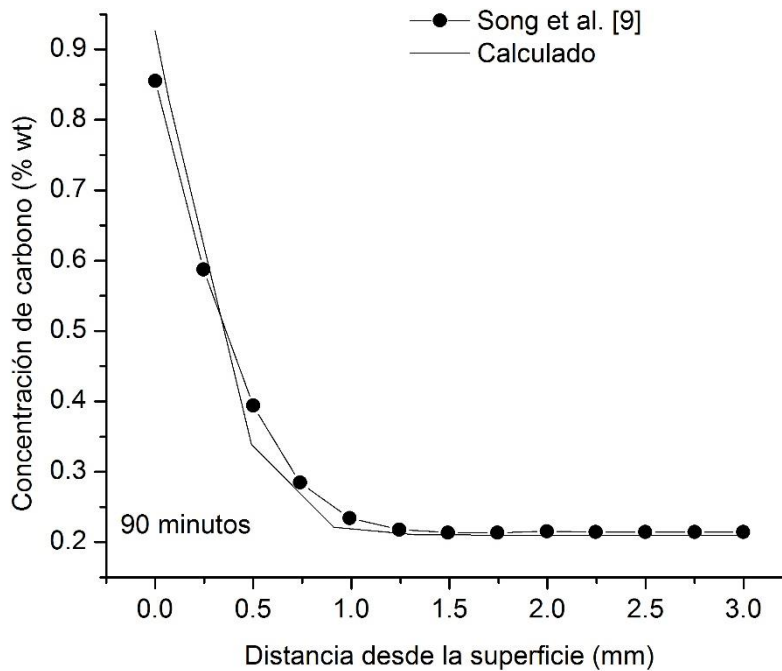


Figura 3.16 Distribución del contenido de carbono en la simulación del carburizado para 180 minutos.



**Figura 3.17** Distribución del contenido de carbono en la simulación del carburizado para 90 minutos.

## 3.6.2 Experimental

### 3.6.2.1 Análisis químico

El engrane de acero bajo estudio primero fue analizado químicamente, para corroborar que cumple con la especificación ETN-22, en un espectrofotómetro de emisión óptica por chispa marca OBLF, N/S 1248, modelo QSN750-II, con resolución de 0.001 %wt. para la mayoría de los elementos que puede cuantificar. Posteriormente, se analizó la concentración de carbono en la capa carburizada a una distancia de 0.1 mm desde la superficie, progresando en incrementos de 0.1 mm hasta llegar a 2 mm de profundidad, eliminando capas de metal por maquinado con una fresadora con resolución de 0.025 mm, marca Chevalier, N/S KM000302, modelo FM-3VK, con una corona de 50 mm de diámetro e insertos de carburo de tungsteno de 12 mm de diámetro.

### 3.6.2.2 Dureza

El ensayo de dureza por microindentación se llevó a cabo en un durómetro digital marca WILSON, N/S 1202-02-0352, modelo TUKON 1202, con resolución de 0.01  $\mu\text{m}$  (0.00001 mm) y un indentador de diamante Vickers, sobre cuatro dientes del engrane

estudiado en la capa carburizada y núcleo, haciendo una conversión a escala Rockwell C (HRC) directamente en el equipo.

La distancia desde la superficie al centro de cada una de las indentaciones se midió en un microscopio óptico marca NIKON, N/S 1103430, modelo EPIPHOT 200, con un analizador de imágenes Zeiss AxioVision.

## 4. RESULTADOS Y DISCUSIÓN

### 4.1 VALIDACIÓN POR COMPARACIÓN CON MEDICIONES EXPERIMENTALES

#### 4.1.1 Análisis químico

La Tabla 4.1 muestra la composición química indicada en la especificación del material y la obtenida experimentalmente lejos de la superficie carburizada en un espectrofotómetro de emisión óptica.

**Tabla 4.1** Composición química del acero estudiado (engrane).

	Concentración (% wt.)						
	C	Cr	Mn	Si	Ni	Mo	Al
Especificación	0.19-	0.40-	0.90-	-----	-----	0.12-	-----
ETN-22	0.24	0.60	1.20			0.18	
Experimental	0.24	0.61	1.08	0.20	0.12	0.14	0.03
<i>U</i>	±0.014	±0.041	±0.040	±0.0052	±0.0051	±0.011	±0.0054

Los valores experimentales mostrados en la tabla anterior corresponden al promedio de 4 mediciones, realizadas de acuerdo al método de ensayo estándar para análisis de carbono y aceros de baja aleación por espectroscopia de emisión óptica por chispa ASTM E45-17 [48], y para las fuentes de incertidumbre se consideraron las incertidumbres de: la falta de repetibilidad del espectrómetro y no uniformidad del material, la resolución del equipo, la reproducibilidad del método y el material de referencia estándar (*SRM*, por sus siglas en inglés) trazable al NIST. Se reporta la incertidumbre expandida (*U*) con un factor de cobertura  $k = 2$  para un intervalo de confianza del 95.45 %, la cual fue estimada según la norma mexicana NMX-CH-140-IMNC-2002 [49] y su equivalente, el documento JCGM 100:2008 GUM 1995 [50]. El promedio de los resultados experimentales para cada elemento analizado se encuentra en el rango de la especificación ETN-22, a excepción del cromo, el cual cumple con lo establecido por la especificación del material una vez que se considera la incertidumbre. Sin embargo, dicho elemento también presentó la mayor incertidumbre

estimada, dado que la principal contribución (68 %) en el presupuesto de esta se debe a la falta de repetibilidad del espectrómetro y la no uniformidad del material.

En lo que respecta al análisis del carbono cada 0.1 mm en la capa carburizada, desde la superficie hasta los 2 mm de profundidad, el método más apropiado es el de espectroscopia de emisión óptica por chispa, debido a que las dimensiones de la pieza y la distancia requerida son insuficientes para el tamaño de muestra que requiere el método de combustión para la determinación de carbono y azufre ASTM E 1019-11 [51], el cual sugiere aproximadamente 1 g de muestra, quedando fuera del alcance del presente estudio.

Para el análisis por emisión óptica por chispa la muestra fue maquinada cada 0.1 mm desde la superficie en una fresadora, como se muestra en la Figura 4.1, y llevada al espectrofotómetro de emisión óptica para la cuantificación de los elementos.



**Figura 4.1** Maquinado de la pieza cada 0.1 mm desde la superficie.

Asimismo, se consideró que la capa carburizada presenta un gradiente de carbono, por lo cual se verificó el equipo con materiales de referencia estándar trazables al NIST, con contenidos de carbono, principalmente para monitorear, de  $1.03 \pm 0.01$  %wt.,  $0.87 \pm 0.01$  %wt. y  $0.391 \pm 0.005$  %wt., de los cuales sus diferentes incertidumbres contribuyen a la incertidumbre de medida para ese nivel de concentración. No obstante, los demás



elementos también fueron monitoreados con estándares de concentración similar al acero analizado. La Tabla 4.2 muestra el análisis por emisión óptica por chispa.

**Tabla 4.2** Composición química del acero estudiado cada 0.1 mm desde la superficie en % wt.

Distancia (mm)	C	Cr	Mn	Si	Ni	Mo	Al	Cu
0.0	1.000 ± 0.084	0.617	1.008	0.206	0.130	0.135	0.032	0.193
0.1	0.884 ± 0.032	0.631	1.094	0.200	0.133	0.135	0.027	0.199
0.2	0.816 ± 0.033	0.610	1.085	0.195	0.133	0.134	0.026	0.203
0.3	0.718 ± 0.028	0.613	1.087	0.194	0.133	0.134	0.026	0.200
0.4	0.653 ± 0.017	0.614	1.089	0.194	0.132	0.135	0.026	0.199
0.5	0.597 ± 0.016	0.608	1.093	0.194	0.133	0.136	0.026	0.200
0.6	0.575 ± 0.058	0.613	1.090	0.195	0.132	0.136	0.026	0.199
0.7	0.501 ± 0.053	0.612	1.090	0.193	0.132	0.135	0.027	0.198
0.8	0.442 ± 0.012	0.600	1.085	0.191	0.132	0.136	0.026	0.199
0.9	0.398 ± 0.031	0.605	1.091	0.191	0.133	0.137	0.026	0.201
1.0	0.370 ± 0.037	0.622	1.099	0.195	0.132	0.138	0.026	0.198
1.1	0.334 ± 0.020	0.602	1.099	0.192	0.134	0.138	0.026	0.202
1.2	0.311 ± 0.026	0.608	1.097	0.192	0.133	0.138	0.026	0.200
1.3	0.296 ± 0.024	0.609	1.107	0.192	0.134	0.139	0.026	0.203
1.4	0.299 ± 0.028	0.605	1.111	0.193	0.134	0.139	0.026	0.204
1.5	0.268 ± 0.019	0.605	1.104	0.191	0.133	0.139	0.026	0.202
1.6	0.259 ± 0.016	0.603	1.101	0.191	0.133	0.139	0.026	0.201
1.7	0.260 ± 0.020	0.623	1.111	0.195	0.133	0.140	0.026	0.201
1.8	0.258 ± 0.030	0.607	1.110	0.193	0.134	0.139	0.026	0.203
1.9	0.261 ± 0.030	0.635	1.115	0.197	0.133	0.140	0.026	0.200
2.0	0.246 ± 0.014	0.616	1.115	0.195	0.134	0.140	0.026	0.202

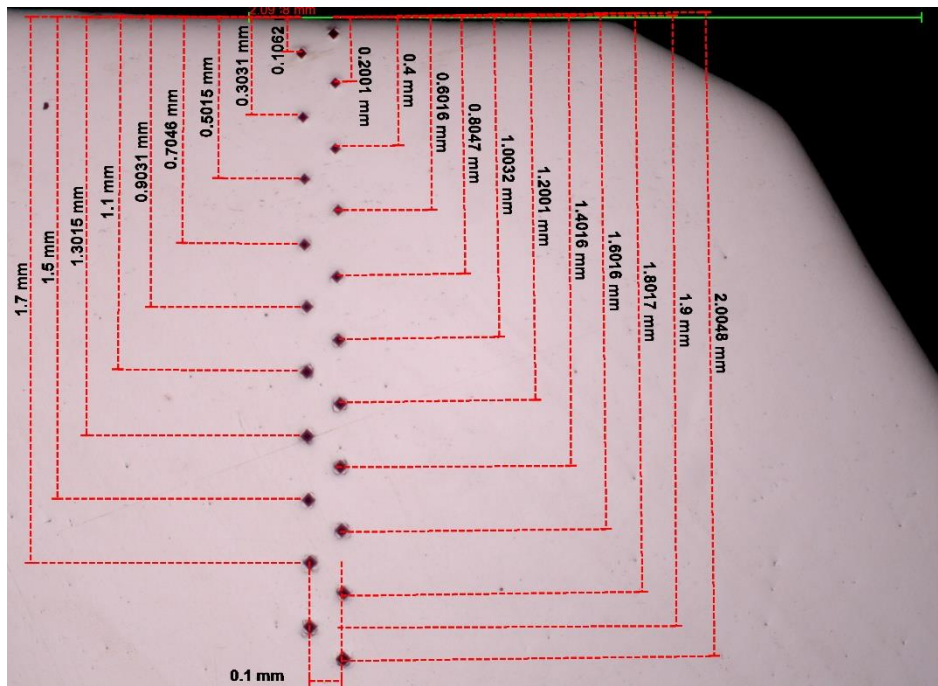
Los resultados experimentales mostrados en la tabla se obtuvieron del promedio de 3 mediciones, realizadas cada 0.1 mm de distancia, en donde, de acuerdo a la tabla, se observa que se mantiene constante la concentración de todos los elementos excepto el carbono, para el cual se reporta la incertidumbre de medida, tomando en cuenta la incertidumbre de los diferentes estándares de acuerdo a su concentración. Nuevamente, se reporta la incertidumbre expandida ( $U$ ) con un factor de cobertura  $k = 2$  para un intervalo de confianza del 95.45 %.

#### 4.1.2 Dureza

Se realizó el ensayo de dureza por microindentación Vickers para evaluar las variaciones en dureza debido al gradiente de concentración de carbono por el tratamiento termoquímico de carburizado. El engrane de acero ETN-22 fue seccionado y preparado metalográficamente de acuerdo a la guía estándar ASTM E3-11 [52], de tal manera que se prepararon cuatro dientes para realizar el perfil de dureza por microindentación Vickers de acuerdo al método de prueba estándar ASTM E384-17 [53].

Para asegurar la validez de los resultados, se verificó el equipo con un material de referencia, es decir, con un bloque patrón de dureza conocida y similar a la que presenta la capa carburizada.

Posteriormente, se realizó el perfil de dureza desde la superficie de los cuatro dientes hacia el núcleo del engrane, haciendo las indentaciones cada 0.1 mm, de acuerdo al estándar Internacional ISO 2639:2002 [54]. Las indentaciones se realizaron sobre dos líneas paralelas normales a la superficie, que también tienen una distancia entre ellas de 0.1 mm, para asegurar que la separación entre dos indentaciones adyacentes fuera mayor a 2.5 veces de la longitud de sus diagonales, medidas a partir de los centros de la indentación, para cumplir con lo establecido en la norma de prueba. La Figura 4.2 muestra las distancias desde la superficie del diente hacia el centro de las indentaciones realizadas, medidas en el microscopio óptico con analizador de imágenes, previamente verificado con una escala patrón calibrada.



**Figura 4.2** Distancia desde la superficie del diente al centro de cada indentación (magnificación 50 X, sin ataque).

La Tabla 4.3 muestra los resultados de dureza en escala Vickers (HV), y la conversión directa del equipo a Rockwell C (HRC), en los cuatro dientes ensayados del engrane ETN-22.

**Tabla 4.3** Resultados de dureza Vickers (HV) con conversión directa del equipo a dureza Rockwell (HRC) en los 4 dientes (D1 - D4).

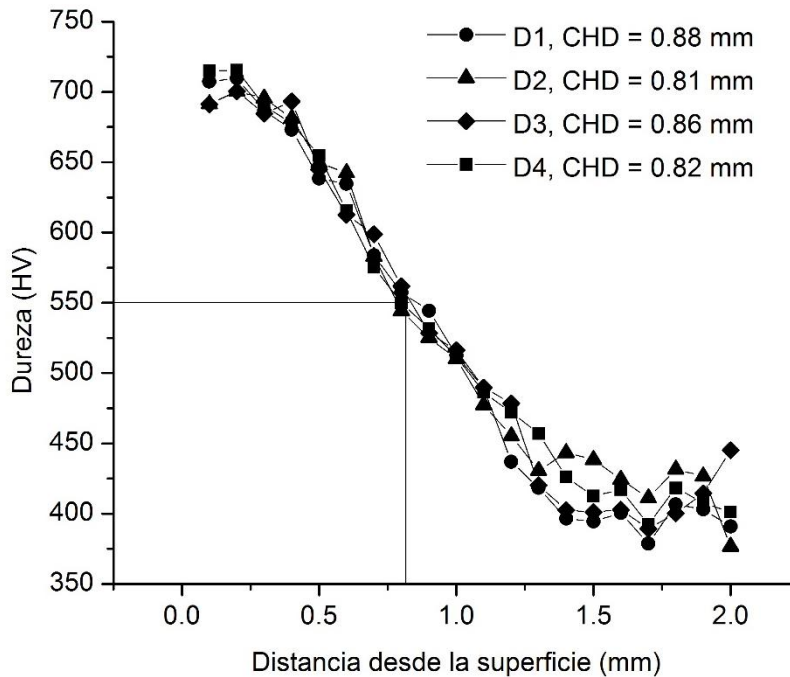
Distancia (mm)	D1		D2		D3		D4		Promedio	
	HV	HRC	HV	HRC	HV	HRC	HV	HRC	HV	HRC
0.1	707.4	60.5	691.6	59.8	691.2	59.8	715.0	60.8	701.3 ±23.38	60.3 ± 1.0
0.2	709.7	60.6	700.4	60.1	700.4	60.1	715.4	60.8	706.5 ±21.25	60.5 ± 0.9
0.3	686.7	59.6	695.6	59.9	684.5	59.5	690.1	59.7	689.2 ±20.41	59.8 ± 0.9
0.4	673.1	59.0	681.3	59.3	693.3	59.8	677.8	59.2	681.4 ±21.76	59.4 ± 1.0
0.5	638.4	57.3	649.6	57.8	644.8	57.6	654.8	58.1	646.9 ±21.10	57.8 ± 1.0
0.6	634.6	57.1	642.4	57.5	612.6	56.0	615.4	56.1	626.3 ±25.00	56.7 ± 1.3
0.7	583.7	54.4	583.0	54.3	598.8	55.2	575.2	53.9	585.2 ±16.62	54.4 ± 0.9
0.8	557.4	52.8	544.3	52.0	561.7	53.1	549.8	52.4	553.3 ±14.68	52.5 ± 0.9
0.9	544.4	52.0	525.1	50.8	528.5	51.0	531.8	51.2	532.5 ±15.05	51.2 ± 1.0
1.0	512.7	50.0	510.2	49.8	516.2	50.2	511.4	49.9	512.7 ±12.66	49.9 ± 0.9
1.1	489.1	48.4	477.4	47.5	489.7	48.4	486.3	48.2	485.6 ±13.70	47.9 ± 1.0
1.2	436.9	44.3	455.2	45.8	478.5	47.6	472.0	47.1	460.7 ±22.60	46.0 ± 1.7
1.3	418.3	42.6	430.6	43.7	420.3	42.8	457.0	45.9	431.6 ±21.90	43.6 ± 1.8
1.4	396.6	40.5	443.4	44.8	402.6	41.1	426.1	43.3	417.2 ±25.10	42.4 ± 2.1
1.5	394.3	40.2	438.5	44.4	401.1	41.3	412.5	42.0	411.6 ±23.20	41.9 ± 2.0
1.6	400.6	40.9	424.4	43.1	402.8	41.1	417.0	42.5	411.2 ±16.95	41.9 ± 1.5
1.7	378.6	38.7	411.2	41.9	389.3	39.7	392.2	40.0	392.8 ±18.51	40.0 ± 1.7
1.8	406.6	41.5	431.5	43.8	400.2	40.8	418.3	42.6	414.2 ±18.66	42.2 ± 1.6
1.9	403.1	41.1	426.7	43.3	414.4	42.2	407.7	41.6	413.0 ±16.17	42.0 ± 1.4
2.0	390.8	39.9	376.6	38.5	445.1	44.9	401.0	40.9	403.4 ±32.30	41.0 ± 2.8

La incertidumbre para el ensayo de dureza Vickers se estimó de acuerdo al apéndice X1 del método estándar ASTM E92-17 [55] para materiales metálicos, en la cual se consideraron las siguientes fuentes de incertidumbre: la falta de repetibilidad del durómetro y la no uniformidad del material, la resolución del sistema de medición para cada indentación, la falta de reproducibilidad del método, la incertidumbre del durómetro en la determinación del error y el sesgo en valor absoluto. Se reporta la incertidumbre expandida ( $U$ ) con un factor de cobertura  $k = 2$  para un intervalo de confianza del 95.45 %.

El ensayo de dureza Vickers es muy útil, principalmente en la evaluación de los materiales carburizados y como control de calidad en los procesos de manufactura industriales, para la determinación de la profundidad de capa efectiva ( $CHD$ , por sus

siglas en inglés), en donde dicha profundidad se refiere a la distancia perpendicular desde la superficie de una capa endurecida hacia el punto donde se especifica un valor de dureza que está en función del contenido de carbono; normalmente, el criterio de dureza para este último caso es de 50 HRC [56] o de 550 HV 1 [54]. Sin embargo, por acuerdo entre las partes interesadas se puede utilizar otro valor de dureza.

La Figura 4.3 muestra la profundidad de capa efectiva en mm para los cuatro dientes analizados.

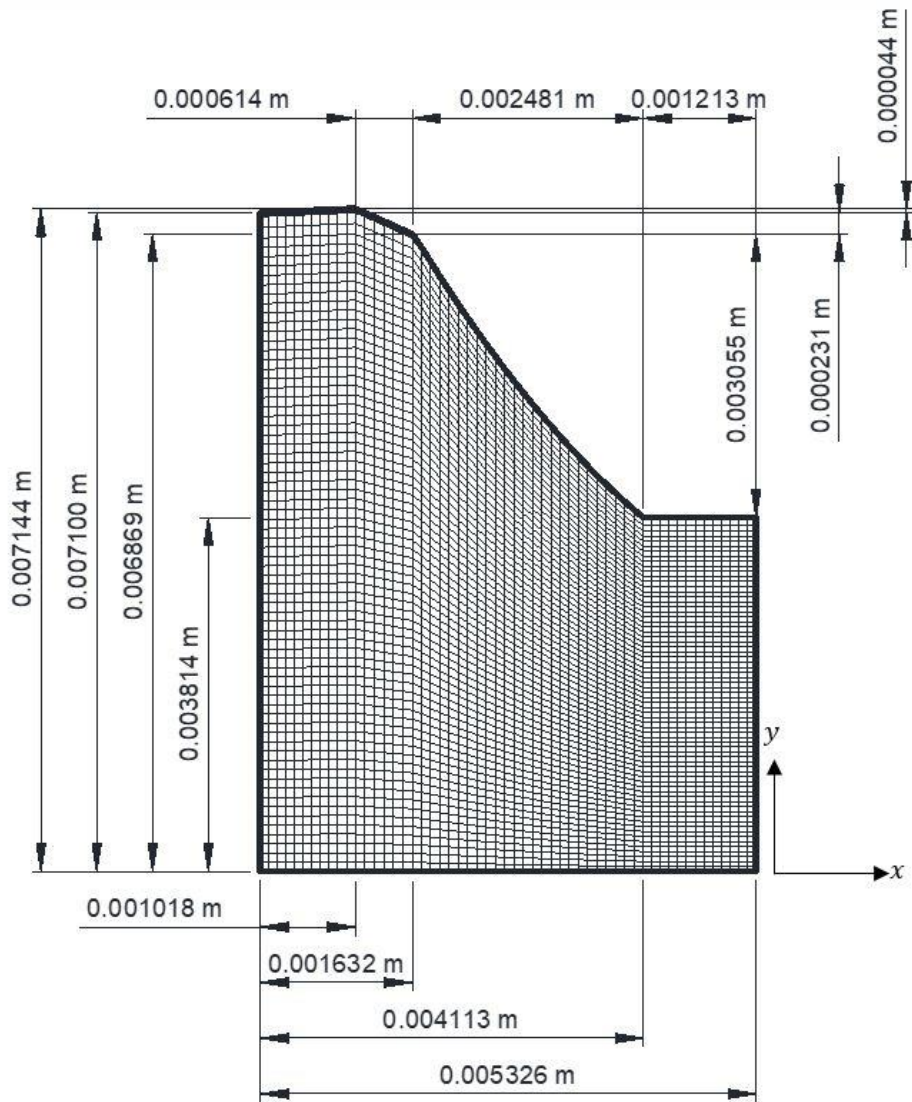


**Figura 4.3** Profundidad de capa efectiva a 550 HV para los cuatro dientes ensayados.

### 4.1.3 Comparaciones modelo vs mediciones

#### 4.1.3.1 Análisis químico

El dominio de cálculo en el modelo fue discretizado de tal forma que se obtuvo una matriz de 55 y 71 volúmenes de control en el eje  $x$  y  $y$ , respectivamente, correspondiente al dominio físico o real, como se muestra en la Figura 4.4, con la estimación del contenido de carbono en los nodos al centro de los volúmenes y en los nodos de la frontera, después de un tiempo de carburizado y difusión de 405 minutos (24300 s), es decir, antes del temple, donde se considera que no hay difusión de carbono.



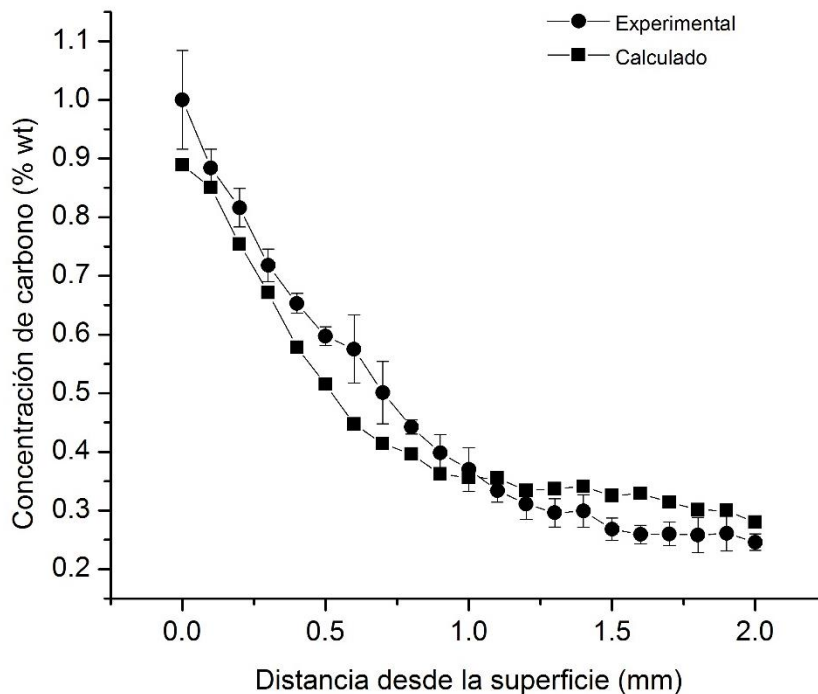
**Figura 4.4** Distribución de los volúmenes de control en el dominio de cálculo físico o real.

Una vez que el modelo proporcionó los resultados del contenido de carbono en cada uno de los nodos (matriz de 57 x 73), se hizo una interpolación entre nodos adyacentes para conocer la concentración de carbono cada 0.1 mm de distancia desde la superficie del diente, tomando en cuenta que dicha distancia fue la empleada para medir experimentalmente la concentración de carbono por emisión óptica, y así poder comparar los resultados del modelo con los experimentales. La Tabla 4.4 presenta los resultados promedio de la concentración de carbono del modelo y los obtenidos experimentalmente.

**Tabla 4.4** Resultados del contenido de carbono promedio medido experimentalmente y calculado en función de la distancia desde la superficie.

Distancia (mm)	[C] (% wt.)	
	Experimental	Calculado
0.0	1.000 ± 0.084	0.889
0.1	0.884 ± 0.032	0.850
0.2	0.816 ± 0.033	0.754
0.3	0.718 ± 0.028	0.671
0.4	0.653 ± 0.017	0.578
0.5	0.597 ± 0.016	0.515
0.6	0.575 ± 0.058	0.447
0.7	0.501 ± 0.053	0.414
0.8	0.442 ± 0.012	0.396
0.9	0.398 ± 0.031	0.362
1.0	0.370 ± 0.037	0.356
1.1	0.334 ± 0.020	0.355
1.2	0.311 ± 0.026	0.334
1.3	0.296 ± 0.024	0.337
1.4	0.299 ± 0.028	0.341
1.5	0.268 ± 0.019	0.325
1.6	0.259 ± 0.016	0.329
1.7	0.260 ± 0.020	0.314
1.8	0.258 ± 0.030	0.301
1.9	0.261 ± 0.030	0.300
2.0	0.246 ± 0.014	0.280

La predicción del contenido de carbono se llevó a cabo usando las ecuaciones de transporte para la difusión de masa. La Figura 4.5 muestra una gráfica del contenido de carbono predicho por el modelo y las mediciones experimentales por emisión óptica por chispa. Los valores calculados muestran una disminución, como se esperaba, en el contenido de carbono desde un valor superficial máximo de 0.889 % wt. a un valor con tendencia asintótica cercana al contenido de carbono inicial de la pieza, 0.280 % wt., a una profundidad de 2 mm, teniendo una buena concordancia general con los datos experimentales.



**Figura 4.5** Perfil de la concentración de carbono obtenido experimentalmente y calculado por el modelo.

En la gráfica no se observa una meseta como la que presentan Rangaswamy y cols. [2] en 0.76 % wt. C para los resultados experimentales por la técnica de combustión (Fig. 3.8) desde la superficie hasta aproximadamente 0.2 mm de profundidad, en donde mencionan que podría estar asociada a la decarburización, soportando su argumento con medidas de dureza, de las cuales obtienen también una meseta; ese mismo comportamiento cercano a la superficie fue mostrado por Kim y cols. [15] para un tratamiento termoquímico de carburizado y difusión a una temperatura de 930°C, con un potencial de carbono de 1.0 y 0.8 %, respectivamente, y un tiempo de permanencia de 20 minutos a 830°C, en donde los resultados de dureza también presentan una meseta cercana a la superficie (Fig. 1.8) similar a la obtenida en la concentración de carbono en función de la distancia. Sin embargo, estos últimos argumentan que dicho comportamiento se debe a una capa de óxido de carbono formada en la superficie. Con base en estos argumentos, soportados por ensayos de dureza, se observa que para los resultados calculados y experimentales en el análisis de la pieza actual, no se presenta decarburación o capa de óxido de carbono en la superficie.



### 4.1.3.2 Dureza

Para los cálculos de dureza se consideraron fórmulas empíricas construidas para aceros enfriados desde temperaturas de austenización, derivadas de la aplicación de métodos tales como regresión múltiple y logística [57]. Las Ecuaciones (4.1) y (4.2) representan la dureza en escala Vickers, considerando la formación de cuatro fases (ferrita, perlita, bainita y martensita) y una fase (martensita) microestructurales en el enfriamiento, respectivamente.

$$HV = 3.7 + 225C + 82Mn + 28Si + 55Cr + 28Ni + 53.5Mo + 147V + 71Cu + 0.09T_A - 3.8\sqrt[4]{v_c} + 68C\sqrt[4]{v_c} - 42W_f - 69W_p - 32.5W_b + 72W_m \quad (4.1)$$

$$HV_m = 200 + 824C + 44Mn + 14Cr + 9Ni + 171V + 78.5Cu + 4.13\sqrt[4]{v_c} \quad (4.2)$$

donde  $C$ ,  $Mn$ ,  $Si$ ,  $Cr$ ,  $Ni$ ,  $Mo$ ,  $V$ ,  $Cu$  representan los porcentajes en peso de los elementos aleantes (% wt.),  $T_A$  es la temperatura de austenización ( $^{\circ}C$ ),  $v_c$  es la velocidad de enfriamiento ( $^{\circ}C/min$ ) a  $700^{\circ}C$ , y  $W_x$  es una variable dependiente dicotómica que describe la ocurrencia en la microestructura del acero:  $x = f(\text{ferrita})$ ,  $p(\text{perlita})$ ,  $b(\text{bainita})$  y  $m(\text{martensita})$ , asumiendo un valor de 0 o 1 de acuerdo a la siguiente ecuación:

$$W_x = \begin{cases} 0 & \text{para } S_x \leq N' \\ 1 & \text{para } S_x > N' \end{cases} \quad (4.3)$$

La variable  $S_x$  se calculó con la siguiente ecuación, y se compara con el valor  $N'$  ( $N' = 0.5$  para la transformación de la ferrita, perlita y martensita, y  $N' = 0.4$  para la transformación de la bainita) para asignar la ocurrencia de la fase microestructural (0 o 1):

$$S_x = \frac{\exp(K_x)}{1 + \exp(K_x)} \quad (4.4)$$

donde  $K_x$  representa la fracción en volumen de las fases ferrita, perlita, bainita y martensita de un acero enfriado continuamente en función de la temperatura de austenización, composición química y velocidad de enfriamiento, como se muestra en las Ecuaciones (4.5) a (4.8), las cuales fueron construidas a partir de diagramas de

transformación en enfriamiento continuo (CCT) por Trzaska [58], en virtud de que estos diagramas proveen información de las temperaturas de inicio y final de transformación de fases, durezas y fracciones en volumen de las fases microestructurales para cada velocidad de enfriamiento. Así, con la aplicación combinada de varias herramientas matemáticas, incluyendo regresiones múltiples y logísticas, dedujo las siguientes ecuaciones:

$$K_f = 18.4 - 15.4C - 1.9Mn + 0.7Si - 2.5Cr - 1.5Ni - 4.8Mo + 2.4V + 1.4Cu - 0.004T_A - \sqrt[4]{v_c} \quad (4.5)$$

$$K_p = 12 - 1.4C - 2.3Mn - 2.3Cr - 1.4Ni - 6Mo + 3.9V - 0.002T_A - 1.2\sqrt[4]{v_c} \quad (4.6)$$

$$K_b = 1.3 - 3.7C + 0.45Mn + 0.2Cr + 0.18Ni + 1.9Mo - 0.17\sqrt[4]{v_c} - 0.57\sqrt{(4.35 - \sqrt[4]{v_c})^2} \quad (4.7)$$

$$K_m = 16.5 + 4.7C + 2.6Mn + 0.6Si + 2.4Cr + 1.2Ni + 1.9Mo + 4.8Cu + 0.006T_A + 1.1\sqrt[4]{v_c} \quad (4.8)$$

Sin embargo, en estas ecuaciones no se consideró el tamaño de grano austenítico ni el tiempo de austenización, debido a la falta de información en la mayoría de los diagramas CCT utilizados. Otro punto a considerar es que las ecuaciones están limitadas a cierto rango en las concentraciones de los elementos de aleación, los cuales se presentan en la Tabla 4.5.

**Tabla 4.5** Rangos de concentración de los elementos para las Ecuaciones (4.5) a (4.8).

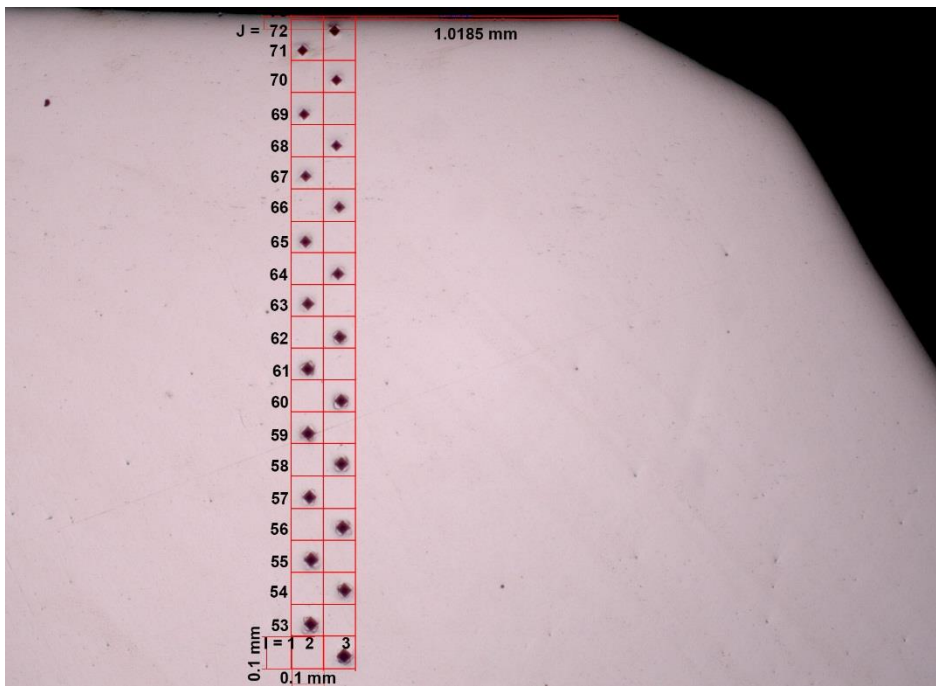
	Concentración (% wt.)							
	C	Cr	Mn	Si	Ni	Mo	V	Cu
Rango	$\begin{pmatrix} 0.06 \\ -0.68 \end{pmatrix}$	$\begin{pmatrix} 0.00 \\ -2.30 \end{pmatrix}$	$\begin{pmatrix} 0.13 \\ -2.04 \end{pmatrix}$	$\begin{pmatrix} 0.12 \\ -1.75 \end{pmatrix}$	$\begin{pmatrix} 0.00 \\ -3.85 \end{pmatrix}$	$\begin{pmatrix} 0.00 \\ -1.05 \end{pmatrix}$	$\begin{pmatrix} 0.00 \\ -0.38 \end{pmatrix}$	$\begin{pmatrix} 0.00 \\ -0.38 \end{pmatrix}$

Otras condiciones adicionales relevantes a la suma de las concentraciones de ciertos elementos se muestran en la siguiente tabla:

**Tabla 4.6** Condiciones adicionales para el rango de aplicación de las Ecuaciones (4.5) a (4.8).

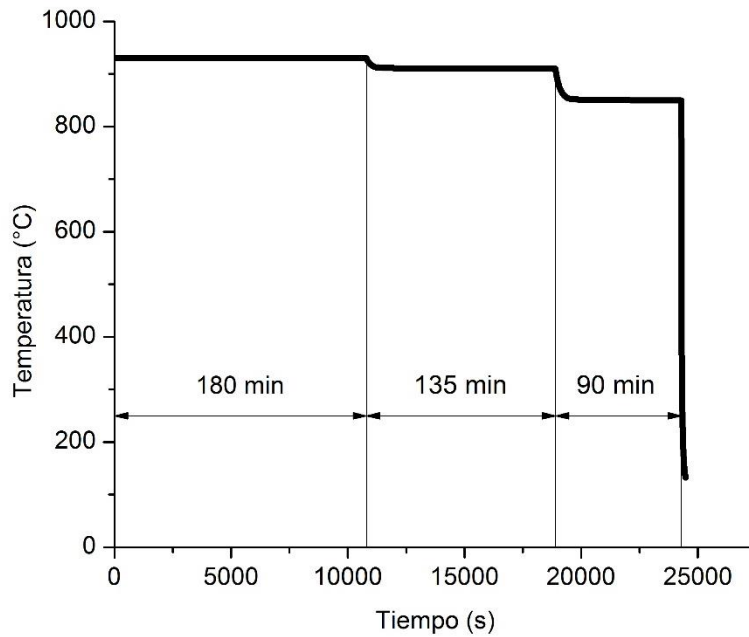
<b>Concentración de los elementos (% wt.)</b>				
	Mn + Cr	Mn + Cr + Ni	Cr + Ni	Mn + Ni
max	3.6	5.6	5.3	4.5

Para la simulación en la mitad del diente se midió una distancia de 0.001018 m (1.018 mm) a partir del borde, donde la longitud es la mayor sobre el eje y del dominio de cálculo, 0.007144 m (7.144 mm), como se muestra en las Figuras 4.4 y 4.6. Se seleccionaron los nodos en el dominio de cálculo que coinciden con las distancias reales desde la superficie donde se hicieron las mediciones de dureza Vickers (cada 0.1 mm), de tal manera que cada nodo al centro del volumen de control representa el valor de la variable dependiente (que para este caso es la concentración de carbono) en el total del volumen, representado ahora por un plano bidimensional, debido a la integración de la ecuación general de transporte (3.31) sobre un volumen de control, que por el teorema de divergencia se puede interpretar como una superficie cerrada de cuatro lados como la que se muestra en la Figura 4.6, en donde la longitud de los lados del cuadrado es de 0.1 mm, con un área de 0.01 mm<sup>2</sup>. Así, esta figura representa la parte experimental de las mediciones de dureza que están en función de la concentración de carbono y el mallado en la simulación, en donde para el nodo (2,71) la distancia desde la superficie es de 0.1 mm, y para el nodo (3,70) la distancia es de 0.2 mm, y así sucesivamente hasta llegar a 2 mm de profundidad.



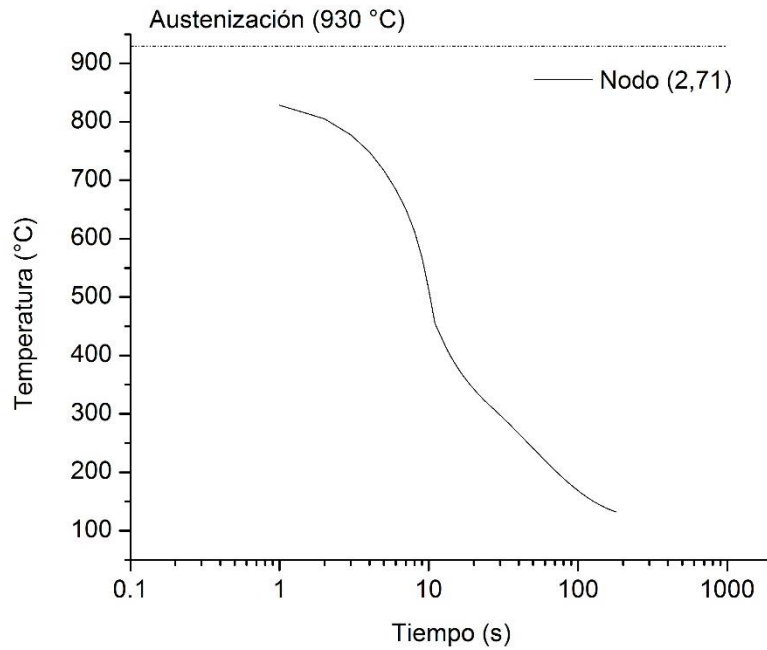
**Figura 4.6** Medición de dureza en la mitad del diente de la pieza estudiada (rombos) y posición de los nodos que coinciden con las indentaciones de dureza en la simulación (cuadrados) (magnificación 50 X, sin ataque).

Para la resolución de las Ecuaciones (4.5) a (4.8), a partir del código se conoce el porcentaje de carbono en cada nodo durante el ciclo completo del tratamiento térmico, manteniendo constante el porcentaje de los elementos aleantes, de acuerdo al análisis químico reportado en la Tabla 4.2. Después, la velocidad de enfriamiento se calculó para el temple solo a 700°C (1300 °F), es decir, a partir de los 405 minutos (24300 s), como se muestra en diagrama esquemático de la Figura 3.2. La velocidad de enfriamiento fue seleccionada a esta temperatura debido a que representa de manera aproximada la región de transformación perlítica para la mayoría de los aceros [32], además de que la dureza está en función de la posición en un ensayo Jominy y de la velocidad de enfriamiento en 700°C (1300 °F). La Figura 4.7 muestra la validación del código para el comportamiento de la temperatura a través del ciclo completo del tratamiento de carburizado, difusión y temple, para el nodo (2,71) a 0.1 mm de distancia desde la superficie, en donde se observa que los valores calculados son iguales al diagrama esquemático de la Figura 3.2, el cual representa las condiciones de temperatura y tiempo a las que fue sometida la pieza carburizada.



**Figura 4.7** Valores de la temperatura a través del tratamiento térmico completo en el nodo (2,71) situado a 0.1 mm de distancia desde la superficie.

Después de la etapa de difusión a 850°C por 405 minutos (24300 s), como ya se mencionó, se calculó la velocidad de enfriamiento en el temple a 700 °C para cada uno de los nodos que coinciden en ubicación con las indentaciones de dureza Vickers. La Figura 4.8 muestra la típica gráfica de temperatura en función del tiempo en escala logarítmica para el nodo (2,71), en donde por interpolación lineal se calculó la velocidad de enfriamiento o pendiente de la curva, para cada nodo a 700°C; también se muestra la ubicación de la temperatura de austenización de 930°C.



**Figura 4.8** Curva de temperatura en función del tiempo (escala logarítmica) empleada para la determinación de la velocidad de enfriamiento en el temple a una temperatura de 700 °C para el nodo (2,71).

Una vez que se determinó el contenido de carbono y de los elementos aleantes (que permanece constante), la temperatura de austenización y la velocidad de enfriamiento para cada nodo, se sustituyen estos valores en las Ecuaciones (4.5) a (4.8) para conocer el valor de la variable  $K_x$ , el cual se sustituye en la Ecuación (4.4) para conocer el valor de  $S_x$ , y comparar entonces con el valor de  $N'$  en la Ecuación (4.3) para determinar la ocurrencia de la fase microestructural,  $W_x$ , y, por último, con este valor, que se sustituye en la Ecuación (4.1), calcular el valor de dureza en escala HV, el cual considera las fases microestructurales de ferrita, perlita, bainita y martensita. Adicionalmente, se calcula el valor de dureza  $HV_m$  con la Ecuación (4.2), la cual solo considera la fase martensítica. La Tabla 4.7 muestra los valores de las variables necesarias para la predicción de dureza en escala HV con las Ecuaciones (4.1) y (4.2), en la cual se observa que, debido a que la velocidad de enfriamiento disminuye desde la superficie hacia el centro de la pieza, después de un milímetro de distancia aparece una fracción de la fase microestructural ferrita ( $W_f$ ), mientras que la fase martensita se forma durante todo el tratamiento térmico del temple ( $W_m$ ), hasta una distancia calculada por el modelo de 1.5 mm, la cual es congruente para la formación de

martensita, debido a que el acero estudiado contiene níquel, cromo y molibdeno, ya que estos elementos aleantes retrasan las reacciones de austenita a perlita y austenita a bainita, lo cual permite que se forme mayor cantidad de martensita a distancias mayores de la superficie a una velocidad de enfriamiento particular [33].

En la tabla también se presentan las durezas calculadas en escala Rockwell C (HRC) con la Ecuación (4.9), tomada del anexo A1 de la norma ASTM E140-12b para conversión de escalas de dureza para aceros no austeníticos [59]:

$$HRC = 31.49 + 0.0796683(HV) - 0.0000355432(HV)^2 - 6728.16(HV)^{-1} \quad (4.9)$$

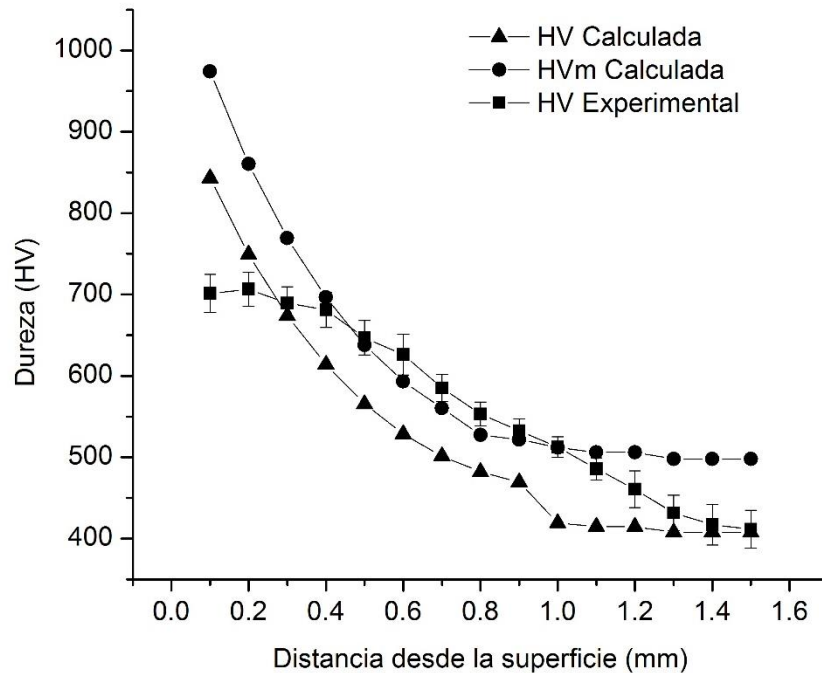
donde HV es la dureza en escala Vickers, considerando las cuatro fases (ferrita, perlita, bainita y martensita) de la Ecuación (4.1) y la fase martensita de la Ecuación (4.2).

**Tabla 4.7** Variables calculadas para la determinación de dureza y valores de dureza Vickers (HV) y Rockwell C (HRC) calculados.

Distancia (mm)	Nodo (I,J)	[C] (%)	$v_c$ (°C/min)	Ferrita			Perlita			Bainita			Martensita			HV <sub>m</sub>	HRC	HRC <sub>m</sub>
				$K_f$	$S_f$	$W_f$	$K_p$	$S_p$	$W_p$	$K_b$	$S_b$	$W_b$	$K_m$	$S_m$	$W_m$			
0.1	2,71	0.818	2010.3	-8.633	0.000	0	-3.931	0.019	0	-3.302	0.036	0	5.998	0.998	1	842.9	974.0	68.5
0.2	3,70	0.680	2012.2	-6.514	0.001	0	-3.740	0.023	0	-2.794	0.058	0	5.352	0.995	1	749.3	860.5	65.9
0.3	2,69	0.569	2012.1	-4.809	0.008	0	-3.585	0.027	0	-2.384	0.084	0	4.832	0.992	1	674.0	769.3	63.0
0.4	3,68	0.481	2012.1	-3.449	0.031	0	-3.461	0.030	0	-2.057	0.113	0	4.417	0.988	1	613.9	696.6	60.1
0.5	2,67	0.410	2011.2	-2.355	0.087	0	-3.361	0.034	0	-1.794	0.143	0	4.082	0.983	1	565.5	638.0	57.3
0.6	3,66	0.356	2010.4	-1.516	0.180	0	-3.284	0.036	0	-1.592	0.169	0	3.826	0.979	1	528.5	593.2	54.9
0.7	2,65	0.316	2009.3	-0.901	0.289	0	-3.227	0.038	0	-1.444	0.191	0	3.637	0.974	1	501.3	560.3	53.0
0.8	3,64	0.288	2008.1	-0.469	0.385	0	-3.187	0.040	0	-1.340	0.208	0	3.505	0.971	1	482.3	537.3	51.5
0.9	2,63	0.269	2007.2	-0.180	0.455	0	-3.160	0.041	0	-1.270	0.219	0	3.416	0.968	1	469.5	521.8	50.5
1.0	3,62	0.257	2006.1	0.007	0.502	1	-3.142	0.041	0	-1.224	0.227	0	3.358	0.966	1	419.3	511.9	49.8
1.1	2,61	0.250	2005.4	0.114	0.528	1	-3.131	0.042	0	-1.198	0.232	0	3.325	0.965	1	414.6	506.2	49.4
1.2	3,60	0.250	2004.6	0.115	0.529	1	-3.131	0.042	0	-1.198	0.232	0	3.324	0.965	1	414.6	506.2	49.4
1.3	2,59	0.240	2004.3	0.269	0.567	1	-3.116	0.042	0	-1.161	0.239	0	3.277	0.964	1	407.8	497.9	48.8
1.4	3,58	0.240	2003.8	0.269	0.567	1	-3.116	0.042	0	-1.160	0.239	0	3.276	0.964	1	407.8	497.9	48.8
1.5	2,57	0.240	2003.7	0.269	0.567	1	-3.116	0.042	0	-1.160	0.239	0	3.276	0.964	1	407.8	497.9	48.8



En la Figura 4.9 se grafican las durezas en escala Vickers obtenidas a partir de las Ecuaciones (4.1) y (4.2), y se comparan con los promedios de las durezas medidas experimentalmente en los cuatro dientes reportados en la Tabla 4.3, en donde se observa un comportamiento de la dureza experimental dentro de las curvas de durezas calculadas.



**Figura 4.9** Comparación de las curvas de dureza Vickers calculadas con las Ecuaciones (4.1) - (4.2) [57] y medidas experimentalmente.

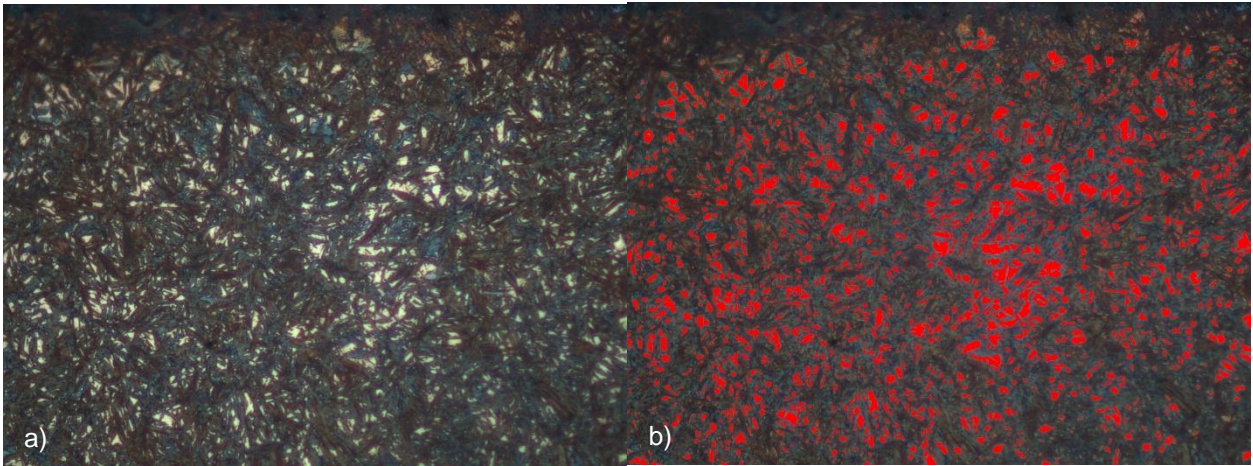
Sin embargo, a una distancia de 0.3 mm desde la superficie, para los resultados experimentales, se observa una ligera meseta como la que presentaron Rangaswamy y cols. [2] y Kim y cols. [15] para el perfil de carbono y las mediciones de dureza. No obstante, esta meseta sólo se presentó para la medición de dureza experimental, y no para la medición de la concentración de carbono experimental (ver Figura 4.5), por lo que no se podría soportar un argumento similar al que presentan dichos autores, en el cual atribuyen sus resultados a la decarburación o capa de óxido de carbono formada en la superficie. En todo caso, podría pensarse que debido a que en la superficie hay mayor contenido de carbono, y la fracción de volumen de austenita retenida y la temperatura de inicio de transformación martensítica están en función de este, por lo tanto, en la superficie el contenido de austenita retenida es mayor, como se observa en

la Tabla 4.8, la cual muestra los promedios de la fracción de austenita retenida cuantificada en cuatro campos por rango de distancia y por diente, en el analizador de imágenes a una magnificación de 1000X, que corresponde a una longitud aproximada de 0.1 mm por campo, lo cual disminuye la dureza en esta zona carburizada.

**Tabla 4.8** Resultados promedio de austenita retenida en cuatro campos por diente y por distancia, y valor promedio de los cuatro dientes (D1 - D4) por cada distancia.

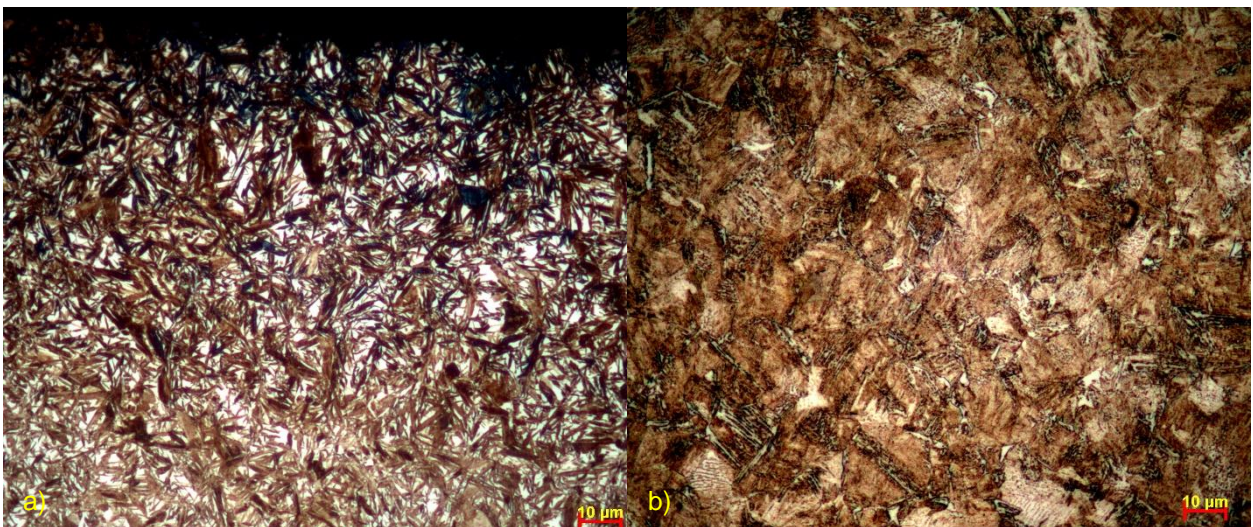
Distancia (mm)	Austenita retenida promedio (%)				Valor promedio de los cuatro dientes
	D1	D2	D3	D4	
0.0 - 0.1	7.8	6.2	5.1	9.0	7.0
0.1 - 0.2	5.1	3.4	3.4	4.9	4.2
0.2 - 0.3	1.7	1.0	1.1	1.1	1.2
0.3 - 0.4	1.3	0.4	0.8	0.3	0.7
0.4 - 0.5	0.4	0.1	0.2	0.2	0.2

En la tabla anterior se observa un gradiente en la fracción de austenita retenida desde la superficie hasta una distancia de 0.5 mm de profundidad, obteniendo un valor de 7.0 % en el rango de 0.0 a 0.1 mm de longitud, a diferencia de Rangaswamy y cols. [2] y Song y cols. [9], que obtuvieron de 25 % a 30 % en volumen a una profundidad de 0.1 mm y 20 %, respectivamente, por difracción de Rayos-X, debido a que la cuantificación de austenita retenida por esta última técnica es siempre mayor que la medida por análisis metalográfico, en donde se cree que esta diferencia se debe a la incapacidad para identificar ópticamente la austenita retenida en una microestructura duplex, típicamente martensita-austenita [60]. La Figura 4.10 a) muestra una micrografía de la superficie (0.0 a 0.1 mm) sobreatacada para mejorar el contraste en las fases, en donde la microestructura consiste de martensita revenida (zonas oscuras) y la fase a cuantificar de austenita retenida (zonas blancas), y en la Figura 4.10 b) se muestra la misma micrografía de la Figura 4.10 a) sobre la cual el analizador de imágenes colorea de rojo las zonas blancas de austenita retenida para hacer la cuantificación.



**Figura 4.10** Cuantificación de austenita retenida por análisis de imágenes (magnificación 1000X, ataque con Nital al 3 %).

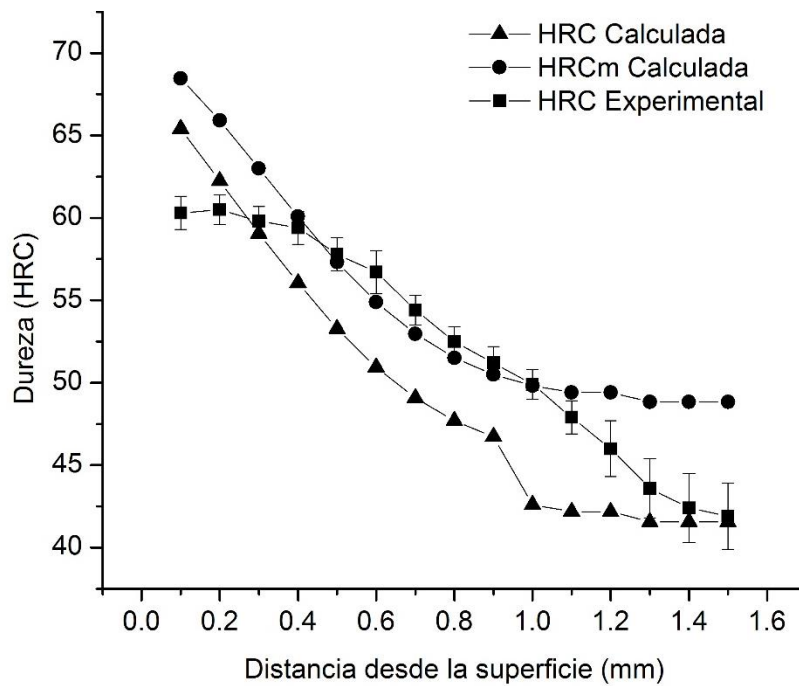
Las microestructuras de la superficie y el centro de uno de los dientes después del temple y revenido se muestran en la Figura 4.11 a) y 4.11 b), respectivamente, en donde en la Figura 4.11 a) se muestra la microestructura en la capa carburizada, la cual consiste de martensita acicular con alto contenido de carbono (zonas oscuras) y austenita retenida (zonas blancas), y en la Figura 4.11 b) la microestructura consiste de martensita en forma de listón o tipo *lath* con bajo contenido de carbono.



**Figura 4.11** Microestructuras en a) la superficie y b) centro de un diente (magnificación 1000X, ataque con Nital al 3 %).

También es importante señalar que los resultados de dureza obtenidos del modelo fueron calculados con fórmulas empíricas construidas para aceros enfriados desde la temperatura de austenización, y que están en función de otras ecuaciones, limitadas a

cierto rango en las concentraciones de los elementos, principalmente para el carbono, debido al gradiente de concentración en la capa carburizada (Tabla 4.5), en donde el valor máximo de concentración para el carbono es de 0.68 %, lo que corresponde a una distancia de 0.2 mm de acuerdo a la Tabla 4.7 para el nodo (3,70), por lo que arriba de esta concentración las fórmulas empíricas ya no son válidas, lo que es congruente con la diferencia observada en los resultados en esta zona. Además, debido a que estas fórmulas fueron creadas a partir de diagramas CCT, existe cierto grado de error debido a la digitalización de los datos. La Figura 4.12 muestra las durezas calculadas con la Ecuación (4.9) y las experimentales con conversión a escala Rockwell C obtenidas directamente del durómetro, en donde se observa el mismo comportamiento que para la escala Vickers.



**Figura 4.12** Comparación de las curvas de dureza en escala Rockwell C calculadas con la Ecuación (4.9) y experimentales reportadas directamente del durómetro.

Adicionalmente, se utilizó un modelo para la predicción de dureza considerando solo la fase martensítica, en el cual la determinación de dureza en escala Vickers está en función de la composición química del acero y la velocidad de enfriamiento a 700°C, como se muestra en la Ecuación (4.10) [61-63]:

$$HV_m = 127 + 949C + 27Si + 11Mn + 16Cr + 8Ni + 21 \log v_c \quad (4.10)$$

donde  $C$ ,  $Si$ ,  $Mn$ ,  $Cr$ ,  $Ni$ , son los contenidos de los elementos aleantes en % wt. y  $v_c$  es la velocidad de enfriamiento en °C/h a una temperatura de 700 °C.

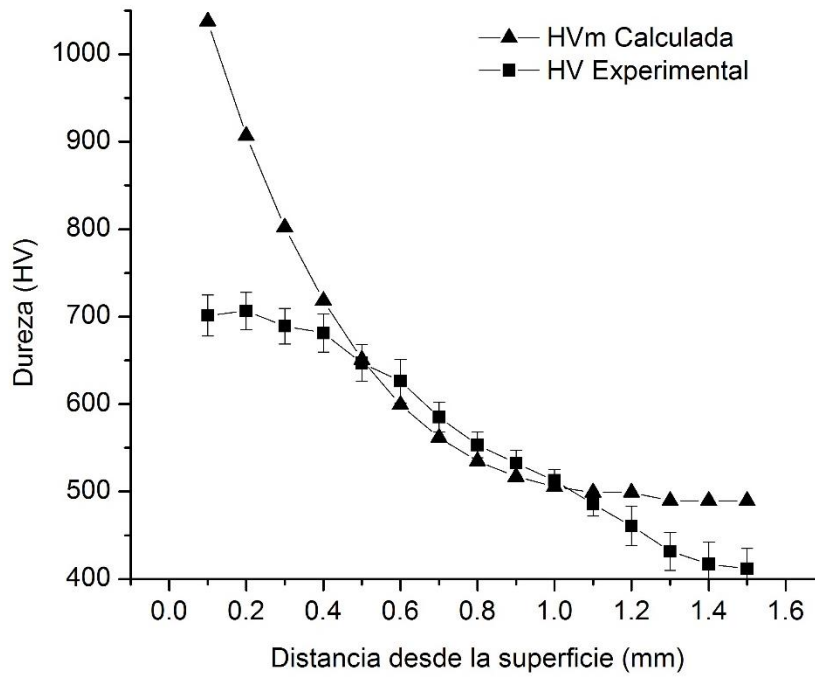
La Tabla 4.9 muestra los resultados de dureza obtenidos con el modelo en escala Vickers y en escala Rockwell C calculados con la Ecuación (4.9). Adicionalmente, se calculó la temperatura de inicio de transformación martensítica,  $M_s$ , con la Ecuación (1.36), la cual está en función del contenido de carbono y de elementos aleantes en el acero, en donde se observa que en la superficie, debido a la mayor concentración de carbono, disminuye dicha temperatura y, por lo tanto, la formación de martensita en esta zona será al final.

**Tabla 4.9** Resultados de dureza para el modelo de la Ecuación (4.10).

Distancia (mm)	Nodo (I,J)	[C] (%)	$v_c$ (°C/h)	Dureza		
				HV <sub>m</sub>	HRC <sub>m</sub>	T <sub>Ms</sub>
0.1	2,71	0.818	120615.6	1037.84	69.4	178.0
0.2	3,70	0.680	120729.6	907.12	67.1	222.3
0.3	2,69	0.569	120726.0	802.11	64.1	257.8
0.4	3,68	0.481	120725.4	718.29	61.0	286.1
0.5	2,67	0.410	120673.8	650.89	58.0	308.9
0.6	3,66	0.356	120622.8	599.26	55.2	326.4
0.7	2,65	0.316	120557.4	561.39	53.0	339.2
0.8	3,64	0.288	120488.4	534.82	51.4	348.2
0.9	2,63	0.269	120430.2	517.03	50.2	354.2
1.0	3,62	0.257	120366.6	505.60	49.4	358.1
1.1	2,61	0.250	120325.2	499.02	48.9	360.3
1.2	3,60	0.250	120278.4	499.02	48.9	360.3
1.3	2,59	0.240	120256.8	489.52	48.2	363.5
1.4	3,58	0.240	120228.0	489.52	48.2	363.5
1.5	2,57	0.240	120223.2	489.52	48.2	363.5

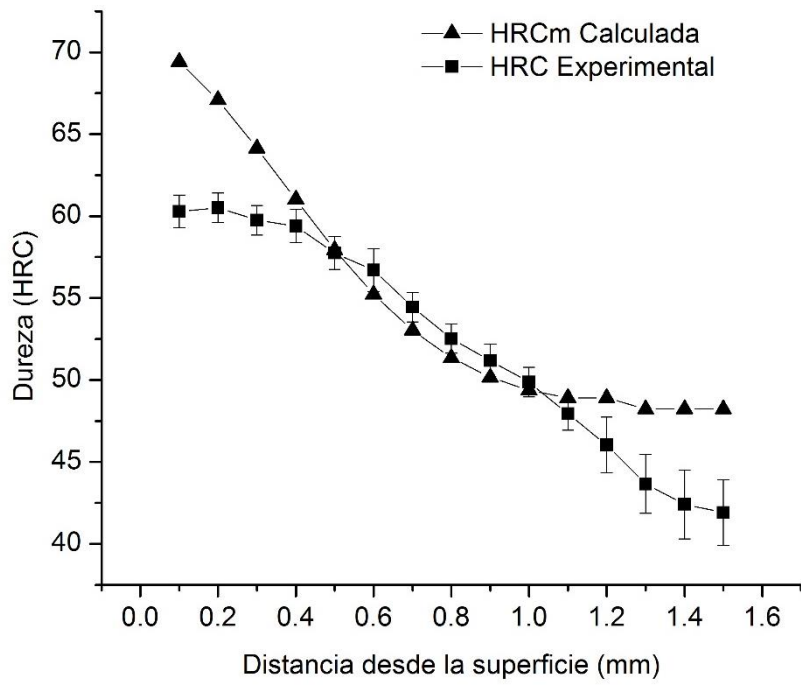
La Figura 4.13 muestra gráficamente los resultados calculados para la dureza en escala Vickers considerando la fase martensítica, y el promedio de los resultados

experimentales medidos en los cuatro dientes, en donde se observa nuevamente que en la superficie hay diferencia entre el modelo y lo experimental.



**Figura 4.13** Comparación de las curvas de dureza en escala Vickers calculadas con la Ecuación (4.10) y las experimentales.

La Figura 4.14 muestra los resultados de dureza en escala Rockwell C, en donde se observa el mismo comportamiento cercano a la superficie ya mostrado antes.



**Figura 4.14** Comparación de las curvas de dureza en escala Rockwell C calculadas con la Ecuación (4.9) y experimentales reportadas directamente del durómetro.





## 5. CONCLUSIONES

Se desarrolló un modelo numérico que describe los fenómenos de transferencia de masa y de calor que ocurren durante el tratamiento térmico de carburizado y temple de una pieza de acero, donde la temperatura y tiempo de tratamiento, el contenido de carbono superficial y el coeficiente de difusión varían durante el proceso; dicho modelo se implementó en la aplicación computacional CONDUCT (acrónimo de “heat CONduction and DUCT flow”) y se validó a partir de datos de la literatura y de mediciones experimentales sobre una pieza de acero de baja aleación. Debido a que en la mayoría de las industrias el ajuste de las variables de los tratamientos térmicos de carburizado y temple se sigue haciendo mediante ensayo y error, teniendo como consecuencia costos e inversiones de tiempo importantes, resulta una ventaja considerable y económica la simulación numérica de los tratamientos térmicos para predecir la distribución de masa y temperatura y, derivado de estas variables, conocer parámetros de control de calidad industriales, tales como la profundidad de capa efectiva y la dureza alcanzada.

Debido a que la mayoría de las piezas a carburizar son engranes con geometría compleja, que requieren una superficie resistente al desgaste y un núcleo suave y tenaz, resulta pertinente utilizar en las simulaciones coordenadas ajustadas al cuerpo, que mantienen una relación uno a uno entre los dominios físicos y computacionales, lo cual facilita la resolución de las ecuaciones de transporte en un sistema ortogonal del dominio de cálculo, principalmente en las fronteras.

Se obtuvo buena concordancia en las validaciones del modelo por comparación con la literatura, que incluyen el manual del usuario de CONDUCT, en donde se obtuvieron los mismos resultados para un problema tipo con diferentes condiciones a la frontera, y también en la reproducción de tratamientos térmicos reportados en cuatro artículos. Dichos artículos no proveen la suficiente información en cuanto a condiciones utilizadas, sin embargo, se hicieron suposiciones con información de otros artículos, y se obtuvieron resultados similares a los reportados por los autores. Además de la validación por comparación con la literatura, el modelo también fue validado experimentalmente, con una pieza carburizada y templada de la cual se conocen todas las condiciones a las que fue sometida, obteniendo resultados con el modelo muy

cercanos a los medidos experimentalmente, por emisión óptica por chispa en el caso de la cuantificación del contenido de carbono, y por medición de dureza experimental, considerando en el modelo ecuaciones empíricas para el cálculo de la dureza. Ambas validaciones son convenientes, ya sea por literatura o experimental, aunque en este estudio se consideraron ambas.

Una vez que se tiene el modelo validado se pueden hacer experimentos virtuales con él, para encontrar condiciones de operación para el tratamiento térmico de carburizado y temple que permitan cumplir con especificaciones de manufactura requeridas a un bajo costo operativo, mientras se elimina la práctica de ensayo y error que tan común es en las industrias dedicadas a la realización de tratamientos térmicos.

## 6. RECOMENDACIONES

El presente modelo es capaz de simular la evolución de la temperatura y la masa para condiciones transitorias de tratamiento térmico en tiempo real, en donde un siguiente paso podría ser el acoplarlo a un algoritmo para realizar optimizaciones al proceso.

Otro paso sería ampliar las capacidades del modelo para predecir los porcentajes de fases al final de un tratamiento térmico, por ejemplo: austenita retenida, perlita, ferrita o bainita, que están en función de la velocidad de enfriamiento, la cual ya se puede calcular.

También se pudiera migrar el código a un lenguaje de programación más gráfico, en el cual se pueda visualizar la geometría compleja del dominio de cálculo, que también contemple una base de datos de propiedades térmicas y químicas para una amplia gama de materiales, y que sea flexible para editar y actualizar la base de datos.



## REFERENCIAS

- [1] H. Jiménez, M. H. Staia, and E. S. Puchi, "Mathematical modeling of a carburizing Process," *Surface Coatings technol.*, vols. 120-121, pp. 358-365, 1999.
- [2] P. Rangaswamy, C. P. Scherer, and M. A. M. Bourke, "Experimental measurements and numerical simulation of stress and microstructure in carburized 5120 steel disks," *Mater. Sci. Eng.*, vol. A298, pp. 158-165, 2001.
- [3] C. Acht, T. Lübben, F. Hoffmann, and H.-W. Zoch, "Simulation of the influence of carbon profile and dimensions on distortion behaviour of SAE 5120 discs by using a design of experiment," *Comput. Mater. Sci.*, vol. 39, pp. 527-532, 2007.
- [4] M. Jung, S. Oh, and Y.-K. Lee, "Predictive model for the carbon concentration profile of vacuum carburized steels with acetylene," *Met. Mater. Int.*, vol. 15, no. 6, pp. 971-975, Dec., 2009.
- [5] S.-J. Lee, D. K. Matlock, and C. J. Van Tyne, "Comparison of two finite element simulation codes used to model the carburizing of steel," *Comput. Mater. Sci.*, vol. 68, pp. 47-54, 2013.
- [6] T. Inoue and K. Arimoto, "Development and implementation of CAE system "HEARTS" for heat treatment simulation based on metallo-thermo-mechanics," *J. Mater. Eng. Perform.*, vol. 6, no. 1, pp. 51-60, Feb., 1997.
- [7] R. Mukai and D.-Y. Ju, "Simulation of carburizing-quenching of a gear. Effect of carbon content on residual stresses and distortion," *J. Phys. IV*, vol. 120, pp. 489-497, 2004.
- [8] B. L. Ferguson, Z. Li, A. M. Freborg, "Modeling heat treatment of steel parts," *Comput. Mater. Sci.*, vol. 34, pp. 274-281, 2005.
- [9] G.-S. Song, X.-H. Liu, G.-D. Wang, and X.-Q. Xu, "Numerical simulation on carburizing and quenching of gear ring," *J. Iron Steel Res. Int.*, vol.14, no. 6, pp. 47-52, 2007.
- [10] A. Sugianto, M. Narazaki, M. Kogawara, A. Shirayori, S.-Y. Kim, and S. Kubota, "Numerical simulation and experimental verification of carburizing-quenching process of SCr420H steel helical gear," *J. Mater. Process. Technol.*, vol. 209, pp. 3597-3609, 2009.
- [11] Z. Li, B. L. Ferguson, and A. Freborg, "Modeling application to reduce distortion of a carburized and quenched steel gear," in *Proc. 6<sup>th</sup> Int. Quenching and Control of Distortion Conf.*, Chicago, IL, USA, 2012, Sep. 9-13, pp. 200-211.
- [12] J. I. Goldstein and A. E. Moren, "Diffusion modeling of the carburization process," *Metall. Trans. A*, vol. 9A, pp. 1515-1525, Nov., 1978.
- [13] Z.-C. Li and B. L. Ferguson, "Computer modeling and validations of steel gear heat treatment processes using commercial software DANTE," *J. Shanghai Jiaotong Univ. (Sci.)*, vol. 16, no. 2, pp. 152-156, 2011.
- [14] Z. Li, A. M. Freborg, B. D. Hansen, and T. S. Srivatsan, "Modeling the effect of carburization and quenching on the development of residual stresses and bending fatigue resistance of steel gears," *J. Mater. Eng. Perform.*, vol. 22, pp. 664-672, 2013.
- [15] D.-W. Kim, H.-H. Cho, W.-B. Lee, K. T. Cho, Y.-G. Cho, S.-J. Kim, and H. N. Han, "A finite element simulation for carburizing heat treatment of automotive gear ring incorporating transformation plasticity," *Mater. Des.*, vol. 99, pp. 243-253, 2016.

- [16] P. Cavaliere, G. Zavarise, and M. Perillo, "Modeling of the carburizing and nitriding processes," *Comput. Mater. Sci.*, vol. 46, pp. 26-35, 2009.
- [17] C. Liu, D.-Y. Ju and T. Inoue, "A numerical modeling of metallo-thermo-mechanical behavior in both carburized and carbonitrided quenching processes," *ISIJ Int.*, vol. 42, no. 10, pp. 1125-1134, Jun., 2002.
- [18] D.-Y. Ju, C. Liu and T. Inoue, "Numerical modeling and simulation of carburized and nitrided quenching process," *J. Mater. Process. Technol.*, vols. 143-144, pp. 880-885, 2003.
- [19] R. Mukai, T. Matsumoto, D.-Y. Ju, T. Suzuki, H. Saito and Y. Ito, "Modeling of numerical simulation and experimental verification for carburizing-nitriding quenching process," *Trans. Nonferrous Met. Soc. China*, vol. 16, pp. 566-571, 2006.
- [20] D.-Y. Ju and T. Inoue, "On the material process simulation code COSMAP – simulated examples and its experimental verification for heat treatment process," *Key Eng. Mater.*, vols. 345-346, pp. 955-958.
- [21] P. K. Agarwal and J. K. Brimacombe, "Mathematical model of heat flow and austenite-perlite transformation in eutectoid carbon steel rods for wire," *Metall. Trans. B*, vol. 12B, pp. 121-133, Mar., 1981.
- [22] P. R. Woodard, S. Chandrasekar, and H. T. Y. Yang, "Analysis of temperature and microstructure in the quenching of steel cylinders," *Metall. Mater. Trans. B*, vol. 30B, pp. 815-822, Aug., 1999.
- [23] S.-H. Kang and Y.-T. Im, "Finite element investigation of multi-phase transformation within carburized carbon steel," *J. Mater. Process. Technol.*, vol. 183, pp. 241-248, 2007.
- [24] J. Ågren, "A revised expression for the diffusivity of carbon in binary Fe-C austenite," *Scr. Metall.*, vol. 20, pp. 1507-1510, 1986.
- [25] D. P. Koistinen and R. E. Marburger, "A general equation prescribing the extent of the austenite-martensite transformation in pure iron-carbon alloys and plain carbon steels," *Acta Metall.*, vol. 7, pp.59-60, 1959.
- [26] S.-J. Lee and Y.-K. Lee, "Finite element simulation of quench distortion in a low-alloy steel incorporating transformation kinetics," *Acta Mater.*, vol. 56, pp. 1482-1490, 2008.
- [27] S.-J. Lee and C. J. Van Tyne, "A kinetics model for martensite transformation in plain carbon and low-alloyed steels," *Metall. Mater. Trans. A*, vol. 43A, pp. 422-427, Feb., 2012.
- [28] ASM Handbook, 1991 ed., vol. 4, American Society for Metals.
- [29] H. K. D. H. Bhadeshia and R. Honeycombe, *Steels Microstructure and Properties*, 3rd ed. Oxford, UK: BH, 2006, pp.95-180.
- [30] R. A. Higgins, *Engineering Metallurgy*, 6th ed. London, UK: Arnold, 1993, pp. 464-466.
- [31] P. Atkins and J. de Paula, *Physical Chemistry*, 7th ed. Oxford, UK: W.H. Freeman and Company NY, 2003, p. 234.
- [32] B. Liščić, H. M. Tensi, L. C. F. Canale and G. E. Totten, *Quenching Theory and Technology*, 2nd ed. Boca Raton, Florida, USA: Taylor & Francis group, 2010.
- [33] W. D. Callister Jr., *Materials Science and Engineering*, 7th ed. New York, NY, USA: Wiley, 2007.
- [34] S. V. Patankar, *CONDUCT-Computation of Conduction and Duct Flow Heat Transfer*, University of Minnesota, Sep., 1988.

- [35] F. P. Incropera, D. P. DeWitt, T. L. Bergeman and A. S. Lavine, Fundamentals of Heat and Mass Transfer, 6th ed. Hoboken, NJ, USA: Wiley, 2007, pp. 202-229.
- [36] J. Tu, G.-H. Yeoh and C. Liu, Computational Fluid Dynamics, 2nd ed. Oxford, UK: B-H, 2013, pp. 125-130.
- [37] M. Schäfer, Computational engineering, Darmstadt, Germany: Springer, 2006.
- [38] S. C. Chapra and R. P. Canale, Numerical methods for engineers, 7th ed. New York, NY, USA: McGraw-Hill, 2015, pp. 890-908.
- [39] F. Moukalled, L. Mangani and M. Darwish, The finite volume method in computational fluid dynamics, Horw, Switzerland: Springer, 2016.
- [40] S. V. Patankar, Numerical heat transfer and fluid flow, NewYork, NY, USA: Taylor & Francis, 1980.
- [41] H. K. Versteeg and W. Malalasekera, Computational fluid dynamics, Malaysia: Longman, 1995.
- [42] J. C. Tannehill, D. A. Anderson and R. H. Pletcher, Computational fluid mechanics and heat transfer, 2nd ed. Washington, USA: Taylor & Francis, 1997, p. 681.
- [43] P. J. M. Sonnemans, Application of body-fitted-coordinates in heat conduction problems, TU/e, Eindhoven, 1992.
- [44] ASM, Thermal properties of metals, 2002 ed. Ohio, ASM international, pp. 228-229, 347.
- [45] ASM handbook, Steel heat treating fundamentals and processes, 2013 ed. Ohio, USA: ASM international, p. 6.
- [46] ASM handbook, Heat treating of irons and steels, Volume 4D, Ohio, USA: ASM international, 2014, p. 291.
- [47] D. V. Nance, Finite volume algorithms for heat conduction, Air Force Res. Lab., Eglin, FL., USA, Tech. Rep. AFRL-RW-EG-TR-2010-049, May 2010.
- [48] ASTM E415-17, Analysis of carbon and low-alloy steel by spark atomic emission spectrometry.
- [49] NMX-CH-140-IMNC-2002, Guía para la expresión de incertidumbre en las mediciones.
- [50] JCGM 100:2008 GUM 1995 with minor corrections, Evaluation of measurement data – Guide to the expression of uncertainty in measurement.
- [51] ASTM E1019-11, Standard test methods for determination of carbon, sulfur, nitrogen, and oxygen in steel, iron, nickel, and cobalt alloys by various combustion and fusion techniques.
- [52] ASTM E3-11 (Reapproved 2017), Standard guide for preparation of metallographic specimens.
- [53] ASTM E384-17, Standard test method for microindentation hardness of materials.
- [54] ISO 2639:2002 (E), Steels – Determination and verification of the depth of carburized and hardened cases, 3rd ed.
- [55] ASTM E92-17, Standard test methods for vickers hardness and knoop hardness of metallic materials.
- [56] SAE J423, Surface vehicle recommended practice, Feb., 1998.
- [57] J. Trzaska, Empirical formulas for the calculations of the hardness of steels cooled from the austenitizing temperature, Arch. Metall. Mater., vol. 61, no. 3, pp.1297-1302, Feb., 2016.

- [58] J. Trzaska, Calculation of volume fractions of microstructural components in steels cooled from the austenitizing temperature, *Achiev. Mater. Manuf. Eng.*, vol. 65, no.1, pp. 38-44, July, 2014.
- [59] ASTM E140 – 12b (Reapproved 2019), Standard hardness conversion tables for metals relationship among Brinell hardness, Vickers hardness, Rockwell hardness, superficial hardness, Knoop hardness, Scleroscope hardness, and Leeb hardness.
- [60] H. Ma, The quantitative assessment of retained austenite in induction hardened ductile iron, M.S. Thesis, Dept. Eng. Mater., Windsor Univ., Ontario, 2012.
- [61] J. Trzaska, A. Jagiełło and L. A. Dobrzański, The calculation of CCT diagrams for engineering steels, *Arch. Mater. Sci. Eng.*, vol. 39, no. 1, pp. 13-20, Sep., 2009.
- [62] J. Trzaska, Calculation of the steel hardness after continuous cooling, *Arch. Mater. Sci. Eng.*, vol. 61, no. 2, pp. 87-92, Jun., 2013.
- [63] M. E. Kakhki, A. Kermanpur and M. A. Golozar, Numerical simulation of continuous cooling of a low alloy steel to predict microstructure and hardness, *Modelling Simul. Mater. Sci. Eng.*, vol. 17, pp. 1-21, May, 2009.



## APÉNDICE A - Discretización de la ecuación general de transporte

### A.1 Discretización en el interior del dominio de cálculo

La ecuación diferencial parcial general de transporte debe ser escrita en términos de  $\xi$  y  $\eta$ , en lugar de  $x$  y  $y$ , y discretizada en el dominio computacional. Para un sistema bidimensional se tiene que:

$$\lambda \frac{\partial \phi}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial x} \left( \Gamma \frac{\partial \phi}{\partial x} \right) + \frac{\partial}{\partial y} \left( \Gamma \frac{\partial \phi}{\partial y} \right) = \Gamma \nabla^2 \phi \quad (\text{A.1})$$

donde  $\nabla$  es el **operador nabla** definido por

$$\nabla = \frac{\partial}{\partial x} \mathbf{i} + \frac{\partial}{\partial y} \mathbf{j} \quad (\text{A.2})$$

Si  $f$  es una función de valores reales de dos variables  $\xi$  y  $\eta$  escrita de la forma  $z = f(\xi, \eta)$ , y las variables  $\xi$  y  $\eta$  son a su vez funciones de  $x$ , tal que  $\xi = g(x)$  y  $\eta = h(x)$ , entonces  $z$  será una función de  $x$  por sustitución, es decir,  $z = f(g(x), h(x))$  y se obtiene la familiar regla de la cadena, que aplicada al operador nabla produce:

$$\frac{\partial}{\partial x} = \frac{\partial}{\partial \xi} \frac{\partial \xi}{\partial x} + \frac{\partial}{\partial \eta} \frac{\partial \eta}{\partial x} \quad (\text{A.3})$$

$$\frac{\partial}{\partial y} = \frac{\partial}{\partial \xi} \frac{\partial \xi}{\partial y} + \frac{\partial}{\partial \eta} \frac{\partial \eta}{\partial y} \quad (\text{A.4})$$

Debido a que en el cambio del dominio físico al computacional se mantiene un eje constante mientras varía el otro, en donde definimos  $\xi = x$  y  $\eta = y/\delta(x)$  tal que al sustituirse en (A.3) y (A.4), considerando ( $y$ ) constante, se obtiene:

$$\frac{\partial \eta}{\partial x} = \frac{\partial}{\partial x} \left( \frac{y}{\delta(x)} \right) = y \frac{\partial}{\partial x} \left( \frac{1}{\delta(x)} \right) = y \frac{\partial (\delta(x))^{-1}}{\partial x} = y \left[ (-1)(\delta(x))^{-2} \frac{\partial \delta(x)}{\partial x} \right] = \frac{-y}{(\delta(x))^2} \frac{\partial \delta(x)}{\partial x} =$$

$$\frac{-y}{\delta(x)} \left( \frac{1}{\delta(x)} \right) \frac{\partial \delta(x)}{\partial x} = \frac{-\eta}{\delta(x)} \frac{\partial \delta(x)}{\partial x} = \frac{-\beta}{\delta} \quad (\text{A.5})$$

donde

$$\beta = \eta \frac{\partial \delta}{\partial \xi} \quad (\text{A.6})$$

$$\delta(x) = \delta \quad (\text{A.7})$$

Aquí  $\eta$  representa una fracción de la dimensión en el dominio físico desde 0 a 1 en la coordenada  $y$ , que al multiplicar por la pendiente en el punto  $\delta(x)$  se obtiene el valor de  $\beta$  que representa el grado de inclinación. Sustituyendo  $\eta$  en (A.4) y considerando  $\delta(x)$  constante se obtiene:

$$\frac{\partial \eta}{\partial y} = \frac{\partial}{\partial y} \left( \frac{y}{\delta(x)} \right) = \frac{1}{\delta(x)} \frac{\partial y}{\partial y} = \frac{1}{\delta(x)} \quad (\text{A.8})$$

$$\frac{\partial \xi}{\partial x} = \frac{\partial(x)}{\partial x} = 1 \quad (\text{A.9})$$

$$\frac{\partial \xi}{\partial y} = \frac{\partial(x)}{\partial y} = 0 \quad (\text{A.10})$$

Sustituyendo las expresiones de la (A.5) a la (A.10) en (A.3) y (A.4)

$$\frac{\partial}{\partial x} = \frac{\partial}{\partial \xi} (1) + \frac{\partial}{\partial \eta} \left( \frac{-\beta}{\delta} \right) \quad (\text{A.11})$$

$$\frac{\partial}{\partial y} = \frac{\partial}{\partial \xi} (0) + \frac{\partial}{\partial \eta} \left( \frac{1}{\delta} \right) = \frac{1}{\delta} \frac{\partial}{\partial \eta} \quad (\text{A.12})$$

sustituyendo (A.11) y (A.12) en el operador nabla (Ecuación (A.2))

$$\nabla = \left( \frac{\partial}{\partial \xi} - \frac{\beta}{\delta} \frac{\partial}{\partial \eta} \right) \mathbf{i} + \left( \frac{1}{\delta} \frac{\partial}{\partial \eta} \right) \mathbf{j} \quad (\text{A.13})$$

Para la discretización del volumen finito de la Ecuación bidimensional (A.1) involucramos el teorema de la divergencia (una versión dimensionalmente superior del teorema fundamental del cálculo); integrando dicha ecuación sobre el interior del volumen infinitesimal de control se hace notar que, en dos dimensiones, el volumen es interpretado como área después de aplicar el teorema de la divergencia, para así obtener una integral de superficie.

$$\int_v \lambda \frac{\partial \phi}{\partial t} dv = \int_v \Gamma \nabla^2 \phi dv = \int_v \Gamma \nabla \cdot \nabla \phi dv = \int_s \Gamma \nabla \phi \cdot d\mathbf{S} = \int_s \Gamma \nabla \phi \cdot \mathbf{n} dS \quad (\text{A.14})$$

Es decir, la integral de volumen de la divergencia del gradiente vectorial ( $\nabla \cdot \nabla \phi$ ), siendo  $\phi$  un campo escalar (ya sea temperatura o masa), es igual al producto punto de la integral de superficie del vector gradiente o vector direccional ( $\nabla \phi$ ) perpendicular a la superficie, por un vector normal ( $\mathbf{n}$ ), dando como resultado la derivada direccional de ( $\phi$ ) a lo largo de la dirección del vector unitario, en donde el máximo valor de la

derivada direccional o vector gradiente será  $|\nabla\phi|$ , y se obtiene cuando  $\mathbf{n}$  tiene la misma dirección que  $\nabla\phi$  de acuerdo a:

$$\nabla\phi \cdot \mathbf{n} = |\nabla\phi| |\mathbf{n}| \cos \theta \quad (\text{A.15})$$

debido a que  $\mathbf{n}$  es unitario,  $|\mathbf{n}| = 1$ , y cuando  $\theta = 0^\circ$ ,  $\cos \theta = 1$ , es decir, cuando  $\nabla\phi$  y  $\mathbf{n}$  son paralelos están en la misma dirección y se obtendrá el valor máximo. La Figura A.1 muestra este vector unitario en la cara  $s_1$  de un volumen de control en los ejes  $\xi$  y  $\eta$ .



**Figura A.1** Configuración de un volumen de control en el cual se observan las fronteras  $s_1$  a  $s_4$  y el vector unitario  $\mathbf{n}$  en el dominio computacional [47].

Los vectores unitarios normales a cada frontera del volumen de control en el dominio computacional son:

- $s_3$  (superficie derecha sobre el eje  $\xi$ )

Normalizando el vector perpendicular a  $\xi$

$$\mathbf{n} = \frac{\nabla\xi}{|\nabla\xi|} \quad (\text{A.16})$$

tomando el gradiente del campo escalar  $\xi$ , que se considera constante respecto de  $x$

$$\nabla\xi = \frac{\partial\xi}{\partial x} \mathbf{i} + \frac{\partial\xi}{\partial y} \mathbf{j} \quad (\text{A.17})$$

sustituyendo las Ecuaciones (A.9) y (A.10) en (A.17)

$$\nabla\xi = (1)\mathbf{i} + (0)\mathbf{j} = \mathbf{i} \quad (\text{A.18})$$

$$|\nabla\xi| = \sqrt{(1)^2 + (0)^2} = 1 \quad (\text{A.19})$$

y, por lo tanto

$$\mathbf{n} = \frac{\mathbf{i}}{1} = \mathbf{i} \quad (\text{A.20})$$

- $s_1$  (superficie izquierda sobre el eje  $-\xi$ )

El vector unitario es igual a aquel de la Ecuación (A.20) pero de signo contrario, es decir

$$\mathbf{n} = -\mathbf{i} \quad (\text{A.21})$$

- $s_2$  (superficie superior sobre el eje  $\eta$ )

El gradiente que proporcionará un vector normal a la superficie será

$$\mathbf{n} = \frac{\nabla\eta}{|\nabla\eta|} \quad (\text{A.22})$$

aplicando el gradiente a  $\eta$

$$\nabla\eta = \frac{\partial\eta}{\partial x}\mathbf{i} + \frac{\partial\eta}{\partial y}\mathbf{j} \quad (\text{A.23})$$

sustituyendo (A.5) y (A.8) en (A.23)

$$\nabla\eta = \frac{-\beta}{\delta}\mathbf{i} + \frac{1}{\delta}\mathbf{j} \quad (\text{A.24})$$

$$|\nabla\eta| = \sqrt{\left(\frac{-\beta}{\delta}\right)^2 + \left(\frac{1}{\delta}\right)^2} = \sqrt{\frac{1}{\delta^2}(\beta^2 + 1)} = \frac{1}{\delta}\sqrt{(\beta^2 + 1)} = \frac{\alpha^{1/2}}{\delta} \quad (\text{A.25})$$

haciendo

$$\alpha = \beta^2 + 1 \quad (\text{A.26})$$

y sustituyendo (A.24) y (A.25) en (A.22)

$$\mathbf{n} = \frac{\frac{-\beta}{\delta}\mathbf{i} + \frac{1}{\delta}\mathbf{j}}{\frac{\alpha^{1/2}}{\delta}} = \frac{\frac{1}{\delta}(-\beta\mathbf{i} + \mathbf{j})}{\frac{\alpha^{1/2}}{\delta}} = \frac{-\beta\mathbf{i} + \mathbf{j}}{\alpha^{1/2}} \quad (\text{A.27})$$

- $s_4$  (superficie inferior sobre el eje  $\eta$ ) para esta superficie será el mismo vector (A.27) pero en sentido opuesto, es decir

$$\mathbf{n} = \frac{\beta\mathbf{i} - \mathbf{j}}{\alpha^{1/2}} \quad (\text{A.28})$$

Ahora se encuentran las diferenciales de superficie  $dS$  de la Ecuación (A.14) para cada una de las áreas superficiales

- $s_1$

$$dS = dy \quad (A.29)$$

sabiendo que

$$y = \eta\delta \quad (A.30)$$

sustituyendo en (A.29)

$$dS = d(\eta\delta) \quad (A.31)$$

en donde  $\delta$  es constante para  $s_1$

$$dS = \delta d\eta \quad (A.32)$$

- $s_3$

Debido a que esta superficie es paralela a  $s_1$  se obtiene el mismo resultado

$$dS = \delta d\eta \quad (A.33)$$

- $s_2$

$$dS = \sqrt{(dx)^2 + (dy)^2} \quad (A.34)$$

sustituyendo  $x$  y  $y$  por  $\xi$  y  $\eta$

$$dS = \sqrt{(d\xi)^2 + (d\eta\delta)^2} \quad (A.35)$$

en donde  $\eta$  es constante en  $s_2$

$$dS = \sqrt{(d\xi)^2 + (\eta d\delta)^2} \quad (A.36)$$

multiplicando por  $d\xi^2/d\xi^2 = 1$  el segundo término en el radicando, se obtiene

$$dS = \sqrt{d\xi^2 + \eta^2 \frac{d\delta^2}{d\xi^2} d\xi^2} \quad (A.37)$$

sustituyendo la Ecuación (A.6) en (A.37)

$$dS = \sqrt{d\xi^2 + \beta^2 d\xi^2} = \sqrt{d\xi^2 (1 + \beta^2)} \quad (\text{A.38})$$

recordando que  $\alpha = \beta^2 + 1$  (Ecuación (A.26)) y sustituyendo

$$dS = \sqrt{\alpha} d\xi = \alpha^{1/2} d\xi \quad (\text{A.39})$$

▪  $s_4$

Debido a que es paralela a  $s_2$  tendrá el mismo valor

$$dS = \alpha^{1/2} d\xi \quad (\text{A.40})$$

De la equivalencia de la integral de volumen a integral de superficie (Ecuación (A.14)) se suman las integrales de las cuatro superficies

$$\int_S \Gamma \nabla \phi \cdot \mathbf{n} dS = \int_{s_1} \Gamma \nabla \phi \cdot \mathbf{n} dS + \int_{s_2} \Gamma \nabla \phi \cdot \mathbf{n} dS + \int_{s_3} \Gamma \nabla \phi \cdot \mathbf{n} dS + \int_{s_4} \Gamma \nabla \phi \cdot \mathbf{n} dS \quad (\text{A.41})$$

▪ Para  $s_1$  se sustituyen (A.13), (A.21) y (A.32)

$$\nabla \phi \cdot \mathbf{n} dS = \left[ \left( \frac{\partial}{\partial \xi} - \frac{\beta}{\delta} \frac{\partial}{\partial \eta} \right) \mathbf{i} + \left( \frac{1}{\delta} \frac{\partial}{\partial \eta} \right) \mathbf{j} \right] \phi \cdot -\mathbf{i} \delta d\eta \quad (\text{A.42})$$

haciendo el gradiente del campo escalar  $\phi$  se obtiene

$$\nabla \phi \cdot \mathbf{n} dS = \left[ \left( \frac{\partial \phi}{\partial \xi} - \frac{\beta}{\delta} \frac{\partial \phi}{\partial \eta} \right) \mathbf{i} + \left( \frac{1}{\delta} \frac{\partial \phi}{\partial \eta} \right) \mathbf{j} \right] \cdot -\mathbf{i} \delta d\eta \quad (\text{A.43})$$

Se utiliza el teorema del producto punto en vectores unitarios, y si  $\theta$  es el ángulo entre los vectores  $a$  y  $b$ , entonces

$$a \cdot b = |a||b| \cos \theta \quad (\text{A.44})$$

Aplicando este teorema a los vectores unitarios de la Ecuación (A.43)

$$\mathbf{i} \cdot -\mathbf{i} = |\mathbf{i}||-\mathbf{i}| \cos 180^\circ = -1 \quad (\text{A.45})$$

$$\mathbf{j} \cdot -\mathbf{i} = |\mathbf{j}||-\mathbf{i}| \cos 90^\circ = 0 \quad (\text{A.46})$$

y sustituyendo en (A.43)

$$\nabla \phi \cdot \mathbf{n} dS = - \left[ \left( \frac{\partial \phi}{\partial \xi} - \frac{\beta}{\delta} \frac{\partial \phi}{\partial \eta} \right) \right] \delta d\eta = \left[ \frac{\beta}{\delta} \frac{\partial \phi}{\partial \eta} - \frac{\partial \phi}{\partial \xi} \right] \delta d\eta \quad (\text{A.47})$$

Así, esta ecuación representa la derivada direccional de  $\phi$  a lo largo de la dirección del vector unitario  $\mathbf{n}$  para la superficie  $s_1$ .

- Para  $s_3$  se sustituyen (A.13), (A.20) y (A.33)

$$\nabla\phi \cdot \mathbf{n} dS = \left[ \left( \frac{\partial\phi}{\partial\xi} - \frac{\beta}{\delta} \frac{\partial\phi}{\partial\eta} \right) \mathbf{i} + \left( \frac{1}{\delta} \frac{\partial\phi}{\partial\eta} \right) \mathbf{j} \right] \cdot \mathbf{i} \delta d\eta \quad (\text{A.48})$$

aplicando el teorema a los vectores unitarios de la Ecuación (A.43)

$$\mathbf{i} \cdot \mathbf{i} = |\mathbf{i}| |\mathbf{i}| \cos 0^\circ = 1 \quad (\text{A.49})$$

$$\mathbf{j} \cdot \mathbf{i} = |\mathbf{j}| |\mathbf{i}| \cos 90^\circ = 0 \quad (\text{A.50})$$

y sustituyendo en (A.48)

$$\nabla\phi \cdot \mathbf{n} dS = \left[ \left( \frac{\partial\phi}{\partial\xi} - \frac{\beta}{\delta} \frac{\partial\phi}{\partial\eta} \right) \right] \delta d\eta \quad (\text{A.51})$$

- Para  $s_2$  se sustituyen (A.13), (A.27) y (A.39)

$$\nabla\phi \cdot \mathbf{n} dS = \left[ \left( \frac{\partial\phi}{\partial\xi} - \frac{\beta}{\delta} \frac{\partial\phi}{\partial\eta} \right) \mathbf{i} + \left( \frac{1}{\delta} \frac{\partial\phi}{\partial\eta} \right) \mathbf{j} \right] \cdot \frac{-\beta\mathbf{i} + \mathbf{j}}{\alpha^{1/2}} \alpha^{1/2} d\xi \quad (\text{A.52})$$

$$\mathbf{j} \cdot \mathbf{j} = |\mathbf{j}| |\mathbf{j}| \cos 0^\circ = 1 \quad (\text{A.53})$$

sustituyendo en (A.52)

$$\nabla\phi \cdot \mathbf{n} dS = \left[ \left( \frac{\partial\phi}{\partial\xi} - \frac{\beta}{\delta} \frac{\partial\phi}{\partial\eta} \right) \frac{-\beta}{\alpha^{1/2}} + \left( \frac{1}{\delta} \frac{\partial\phi}{\partial\eta} \right) \frac{1}{\alpha^{1/2}} \right] \alpha^{1/2} d\xi \quad (\text{A.54})$$

realizando operaciones

$$\nabla\phi \cdot \mathbf{n} dS = \left[ \frac{-\beta}{\alpha^{1/2}} \frac{\partial\phi}{\partial\xi} + \frac{\beta^2}{\delta\alpha^{1/2}} \frac{\partial\phi}{\partial\eta} + \frac{1}{\delta\alpha^{1/2}} \frac{\partial\phi}{\partial\eta} \right] \alpha^{1/2} d\xi \quad (\text{A.55})$$

agrupando denominadores iguales

$$\nabla\phi \cdot \mathbf{n} dS = \left[ \frac{-\beta}{\alpha^{1/2}} \frac{\partial\phi}{\partial\xi} + \frac{\beta^2\partial\phi + \partial\phi}{\delta\alpha^{1/2}\partial\eta} \right] \alpha^{1/2} d\xi = \left[ \frac{-\beta}{\alpha^{1/2}} \frac{\partial\phi}{\partial\xi} + \frac{(\beta^2+1)\partial\phi}{\delta\alpha^{1/2}\partial\eta} \right] \alpha^{1/2} d\xi \quad (\text{A.56})$$

como  $\alpha = \beta^2 + 1$  de acuerdo a la Ecuación (A.26), se sustituye

$$\nabla\phi \cdot \mathbf{n} dS = \left[ \frac{-\beta}{\alpha^{1/2}} \frac{\partial\phi}{\partial\xi} + \frac{\alpha\partial\phi}{\delta\alpha^{1/2}\partial\eta} \right] \alpha^{1/2} d\xi = \left[ \frac{\alpha^{1/2}}{\delta} \frac{\partial\phi}{\partial\eta} - \frac{\beta}{\alpha^{1/2}} \frac{\partial\phi}{\partial\xi} \right] \alpha^{1/2} d\xi \quad (\text{A.57})$$

- Para  $s_4$  se sustituyen (A.13), (A.28) y (A.40)

$$\nabla\phi \cdot \mathbf{n} dS = \left[ \left( \frac{\partial\phi}{\partial\xi} - \frac{\beta}{\delta} \frac{\partial\phi}{\partial\eta} \right) \mathbf{i} + \left( \frac{1}{\delta} \frac{\partial\phi}{\partial\eta} \right) \mathbf{j} \right] \cdot \frac{\beta\mathbf{i}-\mathbf{j}}{\alpha^{1/2}} \alpha^{1/2} d\xi \quad (\text{A.58})$$

$$\mathbf{j} \cdot -\mathbf{j} = |\mathbf{j}| |-\mathbf{j}| \cos 180^\circ = -1 \quad (\text{A.59})$$

sustituyendo en (A.58)

$$\nabla\phi \cdot \mathbf{n} dS = \left[ \left( \frac{\partial\phi}{\partial\xi} - \frac{\beta}{\delta} \frac{\partial\phi}{\partial\eta} \right) \frac{\beta}{\alpha^{1/2}} - \left( \frac{1}{\delta} \frac{\partial\phi}{\partial\eta} \right) \frac{1}{\alpha^{1/2}} \right] \alpha^{1/2} d\xi \quad (\text{A.60})$$

realizando operaciones

$$\nabla\phi \cdot \mathbf{n} dS = \left[ \frac{\beta}{\alpha^{1/2}} \frac{\partial\phi}{\partial\xi} - \frac{\beta^2}{\delta\alpha^{1/2}} \frac{\partial\phi}{\partial\eta} - \frac{1}{\delta\alpha^{1/2}} \frac{\partial\phi}{\partial\eta} \right] \alpha^{1/2} d\xi \quad (\text{A.61})$$

Agrupando denominadores iguales

$$\nabla\phi \cdot \mathbf{n} dS = \left[ \frac{\beta}{\alpha^{1/2}} \frac{\partial\phi}{\partial\xi} - \frac{\beta^2\partial\phi - \partial\phi}{\delta\alpha^{1/2}\partial\eta} \right] \alpha^{1/2} d\xi = \left[ \frac{\beta}{\alpha^{1/2}} \frac{\partial\phi}{\partial\xi} - \frac{(\beta^2+1)\partial\phi}{\delta\alpha^{1/2}\partial\eta} \right] \alpha^{1/2} d\xi \quad (\text{A.62})$$

sustituyendo  $\alpha = \beta^2 + 1$  de acuerdo a la Ecuación (A.26)

$$\nabla\phi \cdot \mathbf{n} dS = \left[ \frac{\beta}{\alpha^{1/2}} \frac{\partial\phi}{\partial\xi} - \frac{\alpha\partial\phi}{\delta\alpha^{1/2}\partial\eta} \right] \alpha^{1/2} d\xi = \left[ \frac{\beta}{\alpha^{1/2}} \frac{\partial\phi}{\partial\xi} - \frac{\alpha^{1/2}}{\delta} \frac{\partial\phi}{\partial\eta} \right] \alpha^{1/2} d\xi \quad (\text{A.63})$$

y definiendo nuevos términos

$$\Omega = -\frac{\alpha}{\delta} \frac{\partial\phi}{\partial\eta} \quad \gamma = -\frac{\partial\phi}{\partial\xi} \quad \Lambda = \beta \frac{\partial\phi}{\partial\xi} \quad \psi = \beta \frac{\partial\phi}{\partial\eta} \quad (\text{A.64})$$

las integrales en cada superficie son:

$$\int_{S_1} \Gamma \nabla\phi \cdot \mathbf{n} dS = \Gamma \int_{S_1} \left[ \frac{\beta}{\delta} \frac{\partial\phi}{\partial\eta} - \frac{\partial\phi}{\partial\xi} \right] \delta d\eta = \Gamma \int_{S_1} \left[ \beta \frac{\partial\phi}{\partial\eta} - \frac{\delta\partial\phi}{\partial\xi} \right] d\eta = \Gamma \int_{S_1} [\psi + \gamma] d\eta \quad (\text{A.65})$$

$$\int_{S_2} \Gamma \nabla\phi \cdot \mathbf{n} dS = \Gamma \int_{S_2} \left[ \frac{\alpha^{1/2}}{\delta} \frac{\partial\phi}{\partial\eta} - \frac{\beta}{\alpha^{1/2}} \frac{\partial\phi}{\partial\xi} \right] \alpha^{1/2} d\xi = \Gamma \int_{S_2} \left[ \frac{\alpha}{\delta} \frac{\partial\phi}{\partial\eta} - \beta \frac{\partial\phi}{\partial\xi} \right] d\xi = \int_{S_2} [-\Omega - \Lambda] d\xi \quad (\text{A.66})$$

$$\int_{S_3} \Gamma \nabla\phi \cdot \mathbf{n} dS = \Gamma \int_{S_3} \left[ \frac{\partial\phi}{\partial\xi} - \frac{\beta}{\delta} \frac{\partial\phi}{\partial\eta} \right] \delta d\eta = \Gamma \int_{S_3} \left[ \frac{\delta\partial\phi}{\partial\xi} - \beta \frac{\partial\phi}{\partial\eta} \right] d\eta = \Gamma \int_{S_3} [-\gamma - \psi] d\eta \quad (\text{A.67})$$

$$\int_{S_4} \Gamma \nabla\phi \cdot \mathbf{n} dS = \Gamma \int_{S_4} \left[ \frac{\beta}{\alpha^{1/2}} \frac{\partial\phi}{\partial\xi} - \frac{\alpha^{1/2}}{\delta} \frac{\partial\phi}{\partial\eta} \right] \alpha^{1/2} d\xi = \Gamma \int_{S_4} \left[ \beta \frac{\partial\phi}{\partial\xi} - \frac{\alpha}{\delta} \frac{\partial\phi}{\partial\eta} \right] d\xi = \int_{S_4} [\Lambda + \Omega] d\xi \quad (\text{A.68})$$



Finalmente, se sustituyen las integrales de superficie en la Ecuación general de transporte (A.14) después de utilizar el teorema de la divergencia

$$\int_v \lambda \frac{\partial \phi}{\partial t} dv = \Gamma \int_{s_1} [\psi + \gamma] d\eta - \Gamma \int_{s_3} [\gamma + \psi] d\eta + \Gamma \int_{s_4} [\Lambda + \Omega] d\xi - \Gamma \int_{s_2} [\Omega + \Lambda] d\xi \quad (\text{A.69})$$

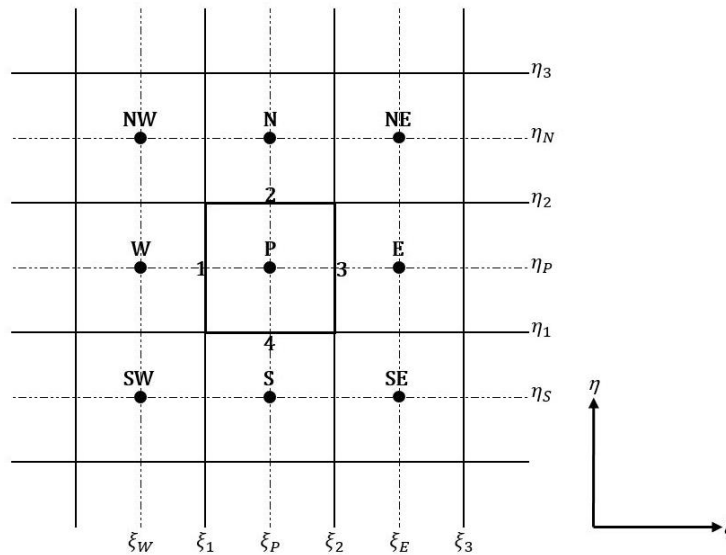
En esta ecuación, el término del lado izquierdo representa la rapidez de cambio de la variable dependiente (campo escalar) almacenada en el interior del volumen, y se proponen las siguientes aproximaciones:

$$\frac{\partial \phi}{\partial t} \cong \frac{\phi_P - \phi_P^0}{\Delta t}; \quad dv = dx dy (1); \quad dx = \Delta \xi; \quad dy = \delta \Delta \eta; \quad dv = \Delta \xi \delta \Delta \eta \quad (\text{A.70})$$

Como se mencionó en la sección de volumen finito  $\phi_P^0$  es el valor de la variable dependiente (llámese temperatura o masa) al tiempo  $t$  y  $\phi_P$  es el valor al tiempo  $t + \Delta t$ . Así, sustituyendo los valores de las Ecuaciones (A.70) en (A.69) se obtiene:

$$\lambda \left( \frac{\phi_P - \phi_P^0}{\Delta t} \right) \Delta \xi \delta \Delta \eta = [\Gamma(\psi + \gamma)]_1 \Delta \eta - [\Gamma(\gamma + \psi)]_3 \Delta \eta + [\Gamma(\Lambda + \Omega)]_4 \Delta \xi - [\Gamma(\Omega + \Lambda)]_2 \Delta \xi \quad (\text{A.71})$$

La ecuación anterior puede expresarse en términos de  $\phi$  en un sistema ortogonal como el representado en la Figura A.2.



**Figura A.2** Representación ortogonal en el dominio computacional para determinación de la variable dependiente  $\phi$  en el nodo interior  $P$  delimitado por las caras 1-4 de un volumen de control.

Debido a que los nuevos términos definidos en las Ecuaciones (A.64), contienen derivadas parciales que están en función de los ejes ortogonales  $\xi$  y  $\eta$ , es necesario aproximar dichas derivadas en cada cara de un volumen de control por diferencias centrales (Ecuación (2.19)) y por interpolación lineal respecto de los nodos vecinos para sustituir el resultado en la Ecuación principal (A.71). Así, tomando como referencia la Figura A.2, para las caras del volumen de control 1-4 se tiene:

$$\gamma_1 = -\delta \frac{\partial \phi}{\partial \xi} = -\delta \left( \frac{\phi_P - \phi_W}{\Delta \xi} \right); \quad \Psi_1 = \beta_1 \left( \frac{\partial \phi}{\partial \eta} \right)_1 \quad (\text{A.72})$$

$$\Omega_2 = -\frac{\alpha}{\delta} \frac{\partial \phi}{\partial \eta} = -\frac{\alpha}{\delta} \left( \frac{\phi_N - \phi_P}{\Delta \eta} \right); \quad \Lambda_2 = \beta_2 \left( \frac{\partial \phi}{\partial \xi} \right)_2 \quad (\text{A.73})$$

$$\gamma_3 = -\delta \frac{\partial \phi}{\partial \xi} = -\delta \left( \frac{\phi_E - \phi_P}{\Delta \xi} \right); \quad \Psi_3 = \beta_3 \left( \frac{\partial \phi}{\partial \eta} \right)_3 \quad (\text{A.74})$$

$$\Omega_4 = -\frac{\alpha}{\delta} \frac{\partial \phi}{\partial \eta} = -\frac{\alpha}{\delta} \left( \frac{\phi_P - \phi_S}{\Delta \eta} \right); \quad \Lambda_4 = \beta_4 \left( \frac{\partial \phi}{\partial \xi} \right)_4 \quad (\text{A.75})$$

resolviendo la derivada parcial para la cara 1 del volumen de control se tiene:

$$\left( \frac{\partial \phi}{\partial \eta} \right)_1 = \left( \frac{\partial \phi}{\partial \eta} \right)_W f_1 + \left( \frac{\partial \phi}{\partial \eta} \right)_P f_2 \quad (\text{A.76})$$

Nuevamente, esta ecuación representa el polinomio de interpolación de primer grado de Lagrange donde  $f_1$  y  $f_2$  son fracciones entre 0 y 1, que ponderan la importancia de cada derivada, en donde la derivada parcial en la cara 1 está en función de los nodos vecinos  $W$  y  $P$  y estos a su vez de los nodos  $NW, SW$  y  $N, S$  respectivamente.

$$\left( \frac{\partial \phi}{\partial \eta} \right)_W = \frac{\phi_{NW} - \phi_{SW}}{\eta_N - \eta_S} \quad (\text{A.77})$$

y  $f_1$  está en función de las distancias en  $\xi$  de acuerdo a:

$$f_1 = \frac{\xi_P - \xi_1}{\xi_P - \xi_W} \quad (\text{A.78})$$

mientras que para la derivada en el nodo P

$$\left( \frac{\partial \phi}{\partial \eta} \right)_P = \frac{\phi_N - \phi_S}{\eta_N - \eta_S} \quad (\text{A.79})$$

$$f_2 = \frac{\xi_1 - \xi_W}{\xi_P - \xi_W} \quad (\text{A.80})$$

sustituyendo (A.77) a (A.80) en (A.76) para la cara 1 se obtiene la siguiente expresión

$$\left(\frac{\partial\phi}{\partial\eta}\right)_1 = \left(\frac{\phi_{NW} - \phi_{SW}}{\eta_N - \eta_S}\right) \left(\frac{\xi_P - \xi_1}{\xi_P - \xi_W}\right) + \left(\frac{\phi_N - \phi_S}{\eta_N - \eta_S}\right) \left(\frac{\xi_1 - \xi_W}{\xi_P - \xi_W}\right) \quad (\text{A.81})$$

mientras que para la cara paralela a esta, es decir la cara 3 se tiene:

$$\left(\frac{\partial\phi}{\partial\eta}\right)_3 = \left(\frac{\partial\phi}{\partial\eta}\right)_P f'_1 + \left(\frac{\partial\phi}{\partial\eta}\right)_E f'_2 \quad (\text{A.82})$$

$$\left(\frac{\partial\phi}{\partial\eta}\right)_P = \frac{\phi_N - \phi_S}{\eta_N - \eta_S} \quad (\text{A.83})$$

$$f'_1 = \frac{\xi_E - \xi_2}{\xi_E - \xi_P} \quad (\text{A.84})$$

$$\left(\frac{\partial\phi}{\partial\eta}\right)_E = \frac{\phi_{NE} - \phi_{SE}}{\eta_N - \eta_S} \quad (\text{A.85})$$

$$f'_2 = \frac{\xi_2 - \xi_P}{\xi_E - \xi_P} \quad (\text{A.86})$$

sustituyendo (A.83) a (A.86) en (A.82) para esta cara 3 se obtiene la siguiente expresión

$$\left(\frac{\partial\phi}{\partial\eta}\right)_3 = \left(\frac{\phi_N - \phi_S}{\eta_N - \eta_S}\right) \left(\frac{\xi_E - \xi_2}{\xi_E - \xi_P}\right) + \left(\frac{\phi_{NE} - \phi_{SE}}{\eta_N - \eta_S}\right) \left(\frac{\xi_2 - \xi_P}{\xi_E - \xi_P}\right) \quad (\text{A.87})$$

mientras que para la cara 2

$$\left(\frac{\partial\phi}{\partial\xi}\right)_2 = \left(\frac{\partial\phi}{\partial\xi}\right)_P f_3 + \left(\frac{\partial\phi}{\partial\xi}\right)_N f_4 \quad (\text{A.88})$$

$$\left(\frac{\partial\phi}{\partial\xi}\right)_P = \frac{\phi_E - \phi_W}{\xi_E - \xi_W} \quad (\text{A.89})$$

$$f_3 = \frac{\eta_N - \eta_2}{\eta_N - \eta_P} \quad (\text{A.90})$$

$$\left(\frac{\partial\phi}{\partial\xi}\right)_N = \frac{\phi_{NE} - \phi_{NW}}{\xi_E - \xi_W} \quad (\text{A.91})$$

$$f_4 = \frac{\eta_2 - \eta_P}{\eta_N - \eta_P} \quad (\text{A.92})$$

sustituyendo (A.89) a (A.92) en (A.88) para esta cara 2 se obtiene la siguiente expresión

$$\left(\frac{\partial \phi}{\partial \xi}\right)_2 = \left(\frac{\phi_E - \phi_W}{\xi_E - \xi_W}\right) \left(\frac{\eta_N - \eta_2}{\eta_N - \eta_P}\right) + \left(\frac{\phi_{NE} - \phi_{NW}}{\xi_E - \xi_W}\right) \left(\frac{\eta_2 - \eta_P}{\eta_N - \eta_P}\right) \quad (\text{A.93})$$

Finalmente, para la cara 4

$$\left(\frac{\partial \phi}{\partial \xi}\right)_4 = \left(\frac{\partial \phi}{\partial \xi}\right)_P f_3' + \left(\frac{\partial \phi}{\partial \xi}\right)_S f_4' \quad (\text{A.94})$$

$$\left(\frac{\partial \phi}{\partial \xi}\right)_P = \frac{\phi_E - \phi_W}{\xi_E - \xi_W} \quad (\text{A.95})$$

$$f_3' = \frac{\eta_1 - \eta_S}{\eta_P - \eta_S} \quad (\text{A.96})$$

$$\left(\frac{\partial \phi}{\partial \xi}\right)_S = \frac{\phi_{SE} - \phi_{SW}}{\xi_E - \xi_W} \quad (\text{A.97})$$

$$f_4' = \frac{\eta_P - \eta_1}{\eta_P - \eta_S} \quad (\text{A.98})$$

sustituyendo (A.95) a (A.98) en (A.94) para esta cara 4 se obtiene la siguiente expresión

$$\left(\frac{\partial \phi}{\partial \xi}\right)_4 = \left(\frac{\phi_E - \phi_W}{\xi_E - \xi_W}\right) \left(\frac{\eta_1 - \eta_S}{\eta_P - \eta_S}\right) + \left(\frac{\phi_{SE} - \phi_{SW}}{\xi_E - \xi_W}\right) \left(\frac{\eta_P - \eta_1}{\eta_P - \eta_S}\right) \quad (\text{A.99})$$

y desglosando términos en la Ecuación principal (A.71):

$$\begin{aligned} \lambda \left(\frac{\phi_P - \phi_P^0}{\Delta t}\right) \Delta \xi \delta \Delta \eta &= (\Gamma \psi)_1 \Delta \eta + (\Gamma \gamma)_1 \Delta \eta - (\Gamma \gamma)_3 \Delta \eta - (\Gamma \psi)_3 \Delta \eta + (\Gamma \Lambda)_4 \Delta \xi + (\Gamma \Omega)_4 \Delta \xi \\ &\quad - (\Gamma \Omega)_2 \Delta \xi - (\Gamma \Lambda)_2 \Delta \xi \end{aligned} \quad (\text{A.100})$$

agrupando términos semejantes

$$\lambda \left(\frac{\phi_P - \phi_P^0}{\Delta t}\right) \Delta \xi \delta \Delta \eta = [(\Gamma \psi)_1 - (\Gamma \psi)_3] \Delta \eta + [(\Gamma \gamma)_1 - (\Gamma \gamma)_3] \Delta \eta + [(\Gamma \Lambda)_4 - (\Gamma \Lambda)_2] \Delta \xi +$$

$$[(\Gamma\Omega)_4 - (\Gamma\Omega)_2]\Delta\xi \quad (\text{A.101})$$

acomodando la ecuación

$$\lambda \left( \frac{\phi_P - \phi_P^0}{\Delta t} \right) \Delta\xi \delta \Delta\eta = [(\Gamma\gamma)_1 - (\Gamma\gamma)_3] \Delta\eta + [(\Gamma\Omega)_4 - (\Gamma\Omega)_2] \Delta\xi + [(\Gamma\psi)_1 - (\Gamma\psi)_3] \Delta\eta$$

$$[(\Gamma\Lambda)_4 - (\Gamma\Lambda)_2] \Delta\xi \quad (\text{A.102})$$

sustituyendo las Ecuaciones (A.72) a (A.75) y las Ecuaciones de las derivadas en las caras 1-4 del volumen de control, (A.81), (A.87), (A.93) y (A.99) en (A.102)

$$\gamma_1 = -\delta \left( \frac{\phi_P - \phi_W}{\Delta\xi} \right); \quad \Omega_2 = -\frac{\alpha}{\delta} \left( \frac{\phi_N - \phi_P}{\Delta\eta} \right); \quad \gamma_3 = -\delta \left( \frac{\phi_E - \phi_P}{\Delta\xi} \right); \quad \Omega_4 = -\frac{\alpha}{\delta} \left( \frac{\phi_P - \phi_S}{\Delta\eta} \right)$$

$$\left[ -\Gamma_1 \delta_1 \left( \frac{\phi_P - \phi_W}{\xi_P - \xi_W} \right) + \Gamma_3 \delta_3 \left( \frac{\phi_E - \phi_P}{\xi_E - \xi_P} \right) \right] (\eta_2 - \eta_1) + \left[ -\Gamma_4 \frac{\alpha_4}{\delta_4} \left( \frac{\phi_P - \phi_S}{\eta_P - \eta_S} \right) + \Gamma_2 \frac{\alpha_2}{\delta_2} \left( \frac{\phi_N - \phi_P}{\eta_N - \eta_P} \right) \right] (\xi_2 - \xi_1) =$$

$$\lambda \left( \frac{\phi_P - \phi_P^0}{\Delta t} \right) \Delta\xi \delta \Delta\eta - \left\{ \Gamma_1 \beta_1 \left[ \left( \frac{\phi_{NW} - \phi_{SW}}{\eta_N - \eta_S} \right) f_1 + \left( \frac{\phi_N - \phi_S}{\eta_N - \eta_S} \right) f_2 \right] - \right.$$

$$\left. \left[ \Gamma_3 \beta_3 \left( \frac{\phi_N - \phi_S}{\eta_N - \eta_S} \right) f_1' + \left( \frac{\phi_{NE} - \phi_{SE}}{\eta_N - \eta_S} \right) f_2' \right] \right\} (\eta_2 - \eta_1) -$$

$$\left\{ \left[ \Gamma_4 \beta_4 \left( \frac{\phi_E - \phi_W}{\xi_E - \xi_W} \right) f_3' + \left( \frac{\phi_{SE} - \phi_{SW}}{\xi_E - \xi_W} \right) f_4' \right] - \right.$$

$$\left. \left[ \Gamma_2 \beta_2 \left( \frac{\phi_E - \phi_W}{\xi_E - \xi_W} \right) f_3 + \left( \frac{\phi_{NE} - \phi_{NW}}{\xi_E - \xi_W} \right) f_4 \right] \right\} (\xi_2 - \xi_1) \quad (\text{A.103})$$

La ecuación anterior se ordena para que tome la forma de la Ecuación general discretizada en dos dimensiones (2.73)

$$a_P \phi_P = a_E \phi_E + a_W \phi_W + a_N \phi_N + a_S \phi_S + b$$

la cual, una vez que se hace el desglose de términos, resulta en:

$$\left[ -\frac{\Gamma_1 \delta_1 \phi_P}{\xi_P - \xi_W} + \frac{\Gamma_1 \delta_1 \phi_W}{\xi_P - \xi_W} + \frac{\Gamma_3 \delta_3 \phi_E}{\xi_E - \xi_P} - \frac{\Gamma_3 \delta_3 \phi_P}{\xi_E - \xi_P} \right] (\eta_2 - \eta_1) +$$

$$\left[ -\frac{\Gamma_4 \alpha_4 \phi_P}{\delta_4 (\eta_P - \eta_S)} + \frac{\Gamma_4 \alpha_4 \phi_S}{\delta_4 (\eta_P - \eta_S)} + \frac{\Gamma_2 \alpha_2 \phi_N}{\delta_2 (\eta_N - \eta_P)} - \frac{\Gamma_2 \alpha_2 \phi_P}{\delta_2 (\eta_N - \eta_P)} \right] (\xi_2 - \xi_1) = \lambda \left( \frac{\phi_P}{\Delta t} \right) \Delta\xi \delta \Delta\eta - \lambda \left( \frac{\phi_P^0}{\Delta t} \right) \Delta\xi \delta \Delta\eta +$$

$$\begin{aligned}
& \left[ -\frac{\Gamma_1\beta_1\phi_{NW}f_1}{\eta_N-\eta_S} + \frac{\Gamma_1\beta_1\phi_{SW}f_1}{\eta_N-\eta_S} - \frac{\Gamma_1\beta_1\phi_{NF}f_2}{\eta_N-\eta_S} + \frac{\Gamma_1\beta_1\phi_{SF}f_2}{\eta_N-\eta_S} + \frac{\Gamma_3\beta_3\phi_{NF}f'_1}{\eta_N-\eta_S} - \frac{\Gamma_3\beta_3\phi_{SF}f'_1}{\eta_N-\eta_S} + \frac{\Gamma_3\beta_3\phi_{NE}f'_2}{\eta_N-\eta_S} - \frac{\Gamma_3\beta_3\phi_{SE}f'_2}{\eta_N-\eta_S} \right] \\
& (\eta_2 - \eta_1) + \left[ -\frac{\Gamma_4\beta_4\phi_{EF}f'_3}{\xi_E-\xi_W} + \frac{\Gamma_4\beta_4\phi_{WF}f'_3}{\xi_E-\xi_W} - \frac{\Gamma_4\beta_4\phi_{SE}f'_4}{\xi_E-\xi_W} + \frac{\Gamma_4\beta_4\phi_{SW}f'_4}{\xi_E-\xi_W} + \frac{\Gamma_2\beta_2\phi_{EF}f_3}{\xi_E-\xi_W} - \frac{\Gamma_2\beta_2\phi_{WF}f_3}{\xi_E-\xi_W} + \frac{\Gamma_2\beta_2\phi_{NE}f_4}{\xi_E-\xi_W} \right. \\
& \left. - \frac{\Gamma_2\beta_2\phi_{NW}f_4}{\xi_E-\xi_W} \right] (\xi_2 - \xi_1) \tag{A.104}
\end{aligned}$$

agrupando términos semejantes

$$\begin{aligned}
& - \left\{ \left[ \frac{\Gamma_1\delta_1}{\xi_P-\xi_W} + \frac{\Gamma_3\delta_3}{\xi_E-\xi_P} \right] (\eta_2 - \eta_1) + \left[ \frac{\Gamma_4\alpha_4}{\delta_4(\eta_P-\eta_S)} + \frac{\Gamma_2\alpha_2}{\delta_2(\eta_N-\eta_P)} \right] (\xi_2 - \xi_1) + \frac{\lambda}{\Delta t} \Delta\xi\delta\Delta\eta \right\} \phi_P = \\
& - \left\{ \left[ \frac{\Gamma_2\alpha_2}{\delta_2(\eta_N-\eta_P)} \right] (\xi_2 - \xi_1) + \left[ \frac{\Gamma_1\beta_1f_2}{\eta_N-\eta_S} - \frac{\Gamma_3\beta_3f'_1}{\eta_N-\eta_S} \right] (\eta_2 - \eta_1) \right\} \phi_N \\
& + \left\{ \left[ \frac{\Gamma_3\beta_3f'_2}{\eta_N-\eta_S} \right] (\eta_2 - \eta_1) + \left[ \frac{\Gamma_2\beta_2f_4}{\xi_E-\xi_W} \right] (\xi_2 - \xi_1) \right\} \phi_{NE} \\
& - \left\{ \left[ \frac{\Gamma_4\alpha_4}{\delta_4(\eta_P-\eta_S)} \right] (\xi_2 - \xi_1) - \left[ \frac{\Gamma_1\beta_1f_2}{\eta_N-\eta_S} - \frac{\Gamma_3\beta_3f'_1}{\eta_N-\eta_S} \right] (\eta_2 - \eta_1) \right\} \phi_S \\
& - \left\{ \left[ \frac{\Gamma_3\beta_3f'_2}{\eta_N-\eta_S} \right] (\eta_2 - \eta_1) + \left[ \frac{\Gamma_4\beta_4f'_4}{\xi_E-\xi_W} \right] (\xi_2 - \xi_1) \right\} \phi_{SE} \\
& - \left\{ \left[ \frac{\Gamma_3\delta_3}{\xi_E-\xi_P} \right] (\eta_2 - \eta_1) + \left[ \frac{\Gamma_4\beta_4f'_3}{\xi_E-\xi_W} - \frac{\Gamma_2\beta_2f_3}{\xi_E-\xi_W} \right] (\xi_2 - \xi_1) \right\} \phi_E \\
& - \left\{ \left[ \frac{\Gamma_1\beta_1f_1}{\eta_N-\eta_S} \right] (\eta_2 - \eta_1) + \left[ \frac{\Gamma_2\beta_2f_4}{\xi_E-\xi_W} \right] (\xi_2 - \xi_1) \right\} \phi_{NW} \\
& - \left\{ \left[ \frac{\Gamma_1\delta_1}{\xi_P-\xi_W} \right] (\eta_2 - \eta_1) - \left[ \frac{\Gamma_4\beta_4f'_3}{\xi_E-\xi_W} - \frac{\Gamma_2\beta_2f_3}{\xi_E-\xi_W} \right] (\xi_2 - \xi_1) \right\} \phi_W \\
& + \left\{ \left[ \frac{\Gamma_1\beta_1f_1}{\eta_N-\eta_S} \right] (\eta_2 - \eta_1) + \left[ \frac{\Gamma_4\beta_4f'_4}{\xi_E-\xi_W} \right] (\xi_2 - \xi_1) \right\} \phi_{SW} \\
& - \frac{\lambda}{\Delta t} \Delta\xi\delta\Delta\eta\phi_P^0 \tag{A.105}
\end{aligned}$$

multiplicándola por  $(-1)$ , sumando los términos y considerando que  $\phi_N = \phi_S$ ,  $\phi_E = \phi_W$ ,  $[\phi_{NE} = \phi_{SE}]_3$ ,  $[\phi_{NE} = \phi_{NW}]_2$ ,  $[\phi_{SE} = \phi_{SW}]_4$ ,  $[\phi_{NW} = \phi_{SW}]_1$  para los nodos cercanos a aquel donde se estima el valor de la variable dependiente  $\phi$ , pero de signo contrario,

ocasiona que se eliminen los coeficientes, quedando la ecuación general de transporte discretizada en el dominio ortogonal de la siguiente manera:

$$\begin{aligned} & \left\{ \left[ \frac{\Gamma_1 \delta_1}{\xi_P - \xi_W} + \frac{\Gamma_3 \delta_3}{\xi_E - \xi_P} \right] (\eta_2 - \eta_1) + \left[ \frac{\Gamma_4 \alpha_4}{\delta_4 (\eta_P - \eta_S)} + \frac{\Gamma_2 \alpha_2}{\delta_2 (\eta_N - \eta_P)} \right] (\xi_2 - \xi_1) + \frac{\lambda}{\Delta t} \Delta \xi \delta \Delta \eta \right\} \phi_P = \\ & \left\{ \left[ \frac{\Gamma_2 \alpha_2}{\delta_2 (\eta_N - \eta_P)} \right] (\xi_2 - \xi_1) \right\} \phi_N + \left\{ \left[ \frac{\Gamma_4 \alpha_4}{\delta_4 (\eta_P - \eta_S)} \right] (\xi_2 - \xi_1) \right\} \phi_S + \left\{ \left[ \frac{\Gamma_3 \delta_3}{\xi_E - \xi_P} \right] (\eta_2 - \eta_1) \right\} \phi_E + \\ & \left\{ \left[ \frac{\Gamma_1 \delta_1}{\xi_P - \xi_W} \right] (\eta_2 - \eta_1) \right\} \phi_W + \frac{\lambda}{\Delta t} \Delta \xi \delta \Delta \eta \phi_P^0 \end{aligned} \quad (\text{A.105})$$

en donde

$$a_N = \left[ \frac{\Gamma_2 \alpha_2}{\delta_2 (\eta_N - \eta_P)} \right] (\xi_2 - \xi_1) \quad (\text{A.106a})$$

$$a_S = \left[ \frac{\Gamma_4 \alpha_4}{\delta_4 (\eta_P - \eta_S)} \right] (\xi_2 - \xi_1) \quad (\text{A.106b})$$

$$a_E = \left[ \frac{\Gamma_3 \delta_3}{\xi_E - \xi_P} \right] (\eta_2 - \eta_1) \quad (\text{A.106c})$$

$$a_W = \left[ \frac{\Gamma_1 \delta_1}{\xi_P - \xi_W} \right] (\eta_2 - \eta_1) \quad (\text{A.106d})$$

$$a_P = a_N + a_S + a_E + a_W + a_P^0 \quad (\text{A.106e})$$

$$a_P^0 = \frac{\lambda}{\Delta t} \Delta \xi \delta \Delta \eta \quad (\text{A.106f})$$

## A.2 Discretización en las fronteras del dominio de cálculo

Para la condición general de un flujo de materia especificado en la frontera existen tres ecuaciones:

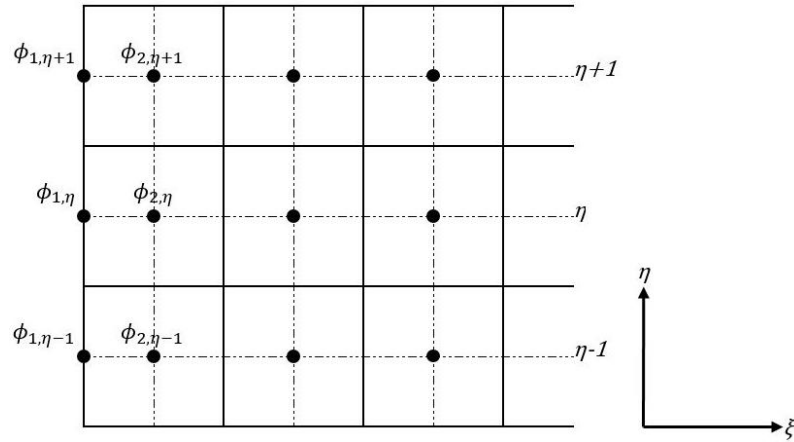
- Para  $s_1$

$$J_B = f_C + f_P \phi_B \quad (\text{A.107})$$

$$J_B = -\Gamma \frac{\partial \phi}{\partial \xi} \quad (\text{A.108})$$

$$J_B = \Gamma [\nabla \phi \cdot \mathbf{n}]_{s_1} = \Gamma \left[ \frac{\beta}{\delta} \frac{\partial \phi}{\partial \eta} - \frac{\partial \phi}{\partial \xi} \right] = \Gamma \frac{\beta}{\delta} \frac{\partial \phi}{\partial \eta} - \Gamma \frac{\partial \phi}{\partial \xi} \quad (\text{A.109})$$

En esta cara del volumen de control  $\delta$  es constante mientras  $\eta$  está variando; la representación gráfica de esta frontera se presenta en la Figura A.3, en donde el flujo es perpendicular al eje  $\eta$  y en dirección al eje  $\xi$ .



**Figura A.3** Representación del flujo en la cara izquierda ( $s_1$ ) del dominio de cálculo para la ecuación general de transporte en el nodo  $\phi_{1,\eta}$ .

Debido a que la variable dependiente  $\phi$  está en función del eje computacional  $\xi$  para esta frontera, se despeja de la Ecuación (A.109)

$$-\Gamma \frac{\partial \phi}{\partial \xi} = J_B - \Gamma \frac{\beta}{\delta} \frac{\partial \phi}{\partial \eta} \quad (\text{A.110})$$

sustituyendo el flujo  $J_B$  de la Ecuación (A.107)

$$-\Gamma \frac{\partial \phi}{\partial \xi} = f_C + f_P \phi_B - \Gamma \frac{\beta}{\delta} \frac{\partial \phi}{\partial \eta} \quad (\text{A.111})$$

Para la pendiente respecto de  $\eta$ , nuevamente, se trabaja con las diferencias centrales del método numérico de diferencias finitas aplicado al nodo  $\phi_{1,\eta}$ , es decir

$$\frac{\partial \phi_{1,\eta}}{\partial \eta} = \frac{\phi_{1,\eta+1} - \phi_{1,\eta-1}}{\eta+1 - \eta-1} \quad (\text{A.112})$$

sustituyendo en (A.111), y acomodando de tal manera que  $J_B = f'_C + f'_P \phi_B$ , se obtiene la ecuación discretizada para la cara  $s_1$  en el nodo  $1,\eta$

$$J_{1,\eta} = f_C - \Gamma \frac{\beta}{\delta} \left( \frac{\phi_{1,\eta+1} - \phi_{1,\eta-1}}{\eta+1 - \eta-1} \right) + f_P \phi_B \quad (\text{A.113})$$



en donde

$$f'_{C_{1,\eta}} = f_{C_{1,\eta}} - \Gamma_{1,\eta} \frac{\beta_{1,\eta}}{\delta_1} \left( \frac{\phi_{1,\eta+1} - \phi_{1,\eta-1}}{\eta+1 - \eta-1} \right) \quad (\text{A.114a})$$

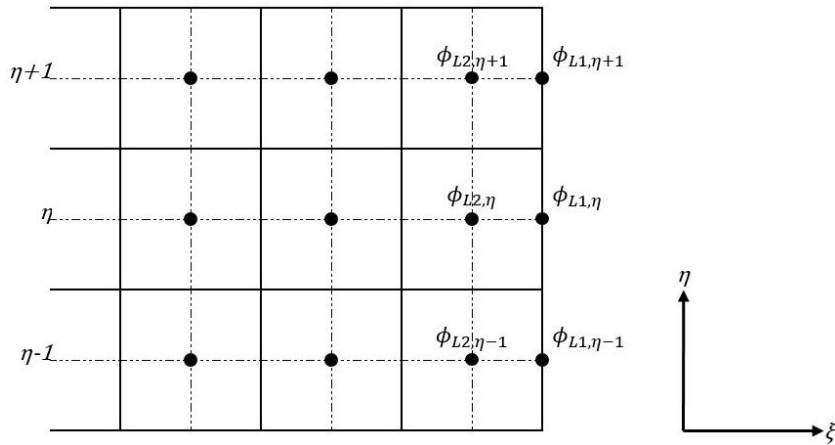
$$f'_{P_{1,\eta}} = f_{P_{1,\eta}} \quad (\text{A.114b})$$

▪ Para  $s_3$

$$J_B = \Gamma \frac{\partial \phi}{\partial \xi} \quad (\text{A.115})$$

$$J_B = \Gamma [\nabla \phi \cdot \mathbf{n}]_{s_3} = \Gamma \left[ \frac{\partial \phi}{\partial \xi} - \frac{\beta}{\delta} \frac{\partial \phi}{\partial \eta} \right] = \Gamma \frac{\partial \phi}{\partial \xi} - \Gamma \frac{\beta}{\delta} \frac{\partial \phi}{\partial \eta} \quad (\text{A.116})$$

En comparación con la Ecuación (A.108), el signo de la Ecuación (A.115) es positivo debido a que la dirección del flujo es de derecha a izquierda y  $L1 > L2$ , donde  $L1$  representa la cara del volumen de control en la frontera derecha del dominio de cálculo en coordenadas ortogonales, y  $L2 = L1 - 1$ , como está representado en la Figura A.4



**Figura A.4** Representación del flujo en la cara derecha ( $s_3$ ) del dominio de cálculo para la ecuación general de transporte en el nodo  $\phi_{L1,\eta}$ .

Debido a que la variable dependiente  $\phi$  está en función del eje computacional  $\xi$  para esta frontera, se despeja de la Ecuación (A.116)

$$\Gamma \frac{\partial \phi}{\partial \xi} = J_B + \Gamma \frac{\beta}{\delta} \frac{\partial \phi}{\partial \eta} \quad (\text{A.117})$$

sustituyendo el flujo  $J_B$  de la Ecuación (A.107)

$$\Gamma \frac{\partial \phi}{\partial \xi} = f_C + f_P \phi_B + \Gamma \frac{\beta}{\delta} \frac{\partial \phi}{\partial \eta} \quad (\text{A.118})$$

aplicando diferencias centrales al nodo  $\phi_{L1,\eta}$

$$\frac{\partial \phi_{L1,\eta}}{\partial \eta} = \frac{\phi_{L1,\eta+1} - \phi_{L1,\eta-1}}{\eta+1 - \eta-1} \quad (\text{A.119})$$

sustituyendo en (A.118), y acomodando de tal manera que  $J_B = f'_C + f'_P \phi_B$ , se obtiene la ecuación discretizada para la cara  $s_3$  en el nodo  $L1,\eta$

$$J_{L1,\eta} = f_C + \Gamma \frac{\beta}{\delta} \left( \frac{\phi_{L1,\eta+1} - \phi_{L1,\eta-1}}{\eta+1 - \eta-1} \right) + f_P \phi_B \quad (\text{A.120})$$

en donde

$$f'_{C_{L1,\eta}} = f_{C_{L1,\eta}} + \Gamma_{L1,\eta} \frac{\beta_{L1,\eta}}{\delta_3} \left( \frac{\phi_{L1,\eta+1} - \phi_{L1,\eta-1}}{\eta+1 - \eta-1} \right) \quad (\text{A.121})$$

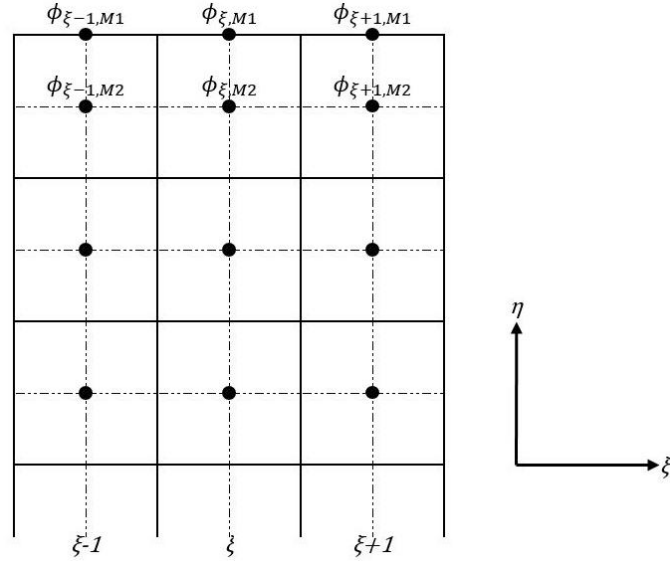
$$f'_{P_{L1,\eta}} = f_{P_{L1,\eta}} \quad (\text{A.122})$$

▪ Para  $s_2$

$$J_B = \frac{\Gamma}{\delta} \frac{\partial \phi}{\partial \eta} \quad (\text{A.123})$$

$$J_B = \Gamma [\nabla \phi \cdot \mathbf{n}]_{s_2} = \Gamma \left[ \frac{\alpha^{1/2}}{\delta} \frac{\partial \phi}{\partial \eta} - \frac{\beta}{\alpha^{1/2}} \frac{\partial \phi}{\partial \xi} \right] = \Gamma \frac{\alpha^{1/2}}{\delta} \frac{\partial \phi}{\partial \eta} - \Gamma \frac{\beta}{\alpha^{1/2}} \frac{\partial \phi}{\partial \xi} \quad (\text{A.124})$$

En la Ecuación (A.123) se consideró el término  $\delta$  debido a que  $y = \eta\delta$  en el dominio físico o real. Además, el signo de dicha ecuación es positivo debido a que la dirección del flujo es de la parte superior hacia la inferior, es decir  $M1 > M2$ , donde  $M1$  representa la cara del volumen de control en la frontera superior del dominio de cálculo en coordenadas ortogonales, y  $M2 = M1 - 1$ , como está representado en la Figura A.5



**Figura A.5** Representación del flujo en la cara superior ( $s_2$ ) del dominio de cálculo para la ecuación general de transporte en el nodo  $\phi_{\xi,M1}$ .

Debido a que la variable dependiente  $\phi$  está en función del eje computacional  $\eta$  para esta frontera, se despeja de la Ecuación (A.124)

$$\Gamma \frac{\partial \phi}{\partial \eta} = \frac{J_B + \Gamma \frac{\beta}{\alpha^{1/2}} \frac{\partial \phi}{\partial \xi}}{\alpha^{1/2}} = \frac{J_B}{\alpha^{1/2}} + \Gamma \frac{\beta}{\alpha} \frac{\partial \phi}{\partial \xi} \quad (\text{A.125})$$

sustituyendo el flujo  $J_B$  de la Ecuación (A.107)

$$\Gamma \frac{\partial \phi}{\partial \eta} = \frac{f_C + f_P \phi_B}{\alpha^{1/2}} + \Gamma \frac{\beta}{\alpha} \frac{\partial \phi}{\partial \xi} = \frac{f_C}{\alpha^{1/2}} + \frac{f_P \phi_B}{\alpha^{1/2}} + \Gamma \frac{\beta}{\alpha} \frac{\partial \phi}{\partial \xi} \quad (\text{A.126})$$

aplicando diferencias centrales al nodo  $\phi_{\xi,M1}$

$$\frac{\partial \phi}{\partial \xi} = \frac{\phi_{\xi+1,M1} - \phi_{\xi-1,M1}}{\xi+1 - \xi-1} \quad (\text{A.127})$$

sustituyendo en (A.126), y acomodando de tal manera que  $J_B = f'_C + f'_P \phi_B$ , se obtiene la ecuación discretizada para la cara  $s_2$  en el nodo  $\xi, M1$

$$J_{\xi,M1} = \frac{f_C}{\alpha^{1/2}} + \Gamma \frac{\beta}{\alpha} \left( \frac{\phi_{\xi+1,M1} - \phi_{\xi-1,M1}}{\xi+1 - \xi-1} \right) + \frac{f_P}{\alpha^{1/2}} \phi_B \quad (\text{A.128})$$

en donde

$$f'_{C_{\xi,M_1}} = \frac{f_{C_{\xi,M_1}}}{\alpha_{\xi,M_1}^{1/2}} + \Gamma_{\xi,M_1} \frac{\beta_{\xi,M_1}}{\alpha_{\xi,M_1}} \left( \frac{\phi_{\xi+1,M_1} - \phi_{\xi-1,M_1}}{\xi+1 - \xi-1} \right) \quad (\text{A.129})$$

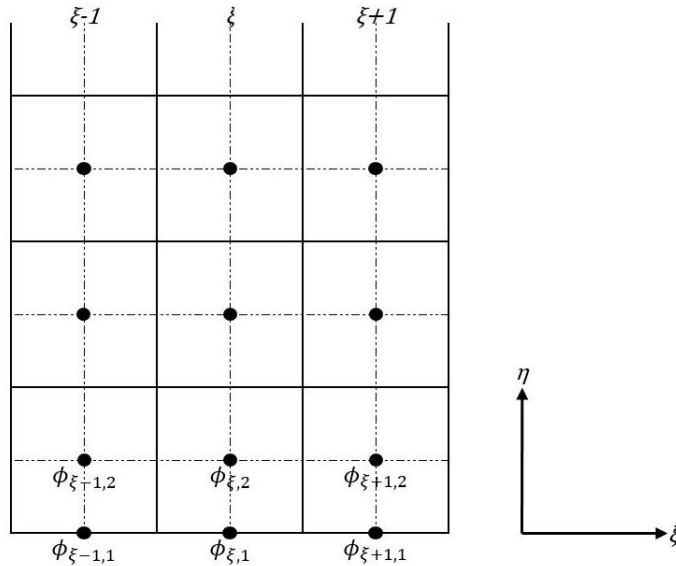
$$f'_{P_{\xi,M_1}} = \frac{f_{P_{\xi,M_1}}}{\alpha_{\xi,M_1}^{1/2}} \quad (\text{A.130})$$

▪ Para  $s_4$

$$J_B = -\frac{\Gamma}{\delta} \frac{\partial \phi}{\partial \eta} \quad (\text{A.131})$$

$$J_B = \Gamma [\nabla \phi \cdot \mathbf{n}]_{s_4} = \Gamma \left[ \frac{\beta}{\alpha^{1/2}} \frac{\partial \phi}{\partial \xi} - \frac{\alpha^{1/2}}{\delta} \frac{\partial \phi}{\partial \eta} \right] = \Gamma \frac{\beta}{\alpha^{1/2}} \frac{\partial \phi}{\partial \xi} - \Gamma \frac{\alpha^{1/2}}{\delta} \frac{\partial \phi}{\partial \eta} \quad (\text{A.132})$$

En la Ecuación (A.131) se consideró el término  $\delta$  debido a que  $y = \eta\delta$  en el dominio físico o real. Además, el signo de dicha ecuación es negativo debido a que la dirección del flujo es de la parte inferior hacia la superior, como está representado en la Figura A.6



**Figura A.6** Representación del flujo en la cara inferior ( $s_4$ ) del dominio de cálculo para la ecuación general de transporte en el nodo  $\phi_{\xi,1}$ .

Debido a que la variable dependiente  $\phi$  está en función del eje computacional  $\eta$  para esta frontera, se despeja de la Ecuación (A.132)

$$-\Gamma \frac{\partial \phi}{\delta \partial \eta} = \frac{J_B - \Gamma \frac{\beta}{\alpha^{1/2}} \frac{\partial \phi}{\partial \xi}}{\alpha^{1/2}} = \frac{J_B}{\alpha^{1/2}} - \Gamma \frac{\beta}{\alpha} \frac{\partial \phi}{\partial \xi} \quad (\text{A.133})$$

sustituyendo el flujo  $J_B$  de la Ecuación (A.107)

$$-\Gamma \frac{\partial \phi}{\delta \partial \eta} = \frac{f_C + f_P \phi_B}{\alpha^{1/2}} - \Gamma \frac{\beta}{\alpha} \frac{\partial \phi}{\partial \xi} = \frac{f_C}{\alpha^{1/2}} + \frac{f_P \phi_B}{\alpha^{1/2}} - \Gamma \frac{\beta}{\alpha} \frac{\partial \phi}{\partial \xi} \quad (\text{A.134})$$

aplicando diferencias centrales al nodo  $\phi_{\xi,1}$

$$\frac{\partial \phi}{\partial \xi} = \frac{\phi_{\xi+1,1} - \phi_{\xi-1,1}}{\xi+1 - \xi-1} \quad (\text{A.135})$$

sustituyendo en (A.134), y acomodando de tal manera que  $J_B = f'_C + f'_P \phi_B$ , se obtiene la ecuación discretizada para la cara  $s_4$  en el nodo  $\xi, 1$

$$J_{\xi,1} = \frac{f_C}{\alpha^{1/2}} - \Gamma \frac{\beta}{\alpha} \left( \frac{\phi_{\xi+1,1} - \phi_{\xi-1,1}}{\xi+1 - \xi-1} \right) + \frac{f_P}{\alpha^{1/2}} \phi_B \quad (\text{A.136})$$

en donde

$$f'_{C_{\xi,1}} = \frac{f_{C_{\xi,1}}}{\alpha_{\xi,1}^{1/2}} - \Gamma_{\xi,1} \frac{\beta_{\xi,1}}{\alpha_{\xi,1}} \left( \frac{\phi_{\xi+1,1} - \phi_{\xi-1,1}}{\xi+1 - \xi-1} \right) \quad (\text{A.137})$$

$$f'_{P_{\xi,1}} = \frac{f_{P_{\xi,1}}}{\alpha_{\xi,1}^{1/2}} \quad (\text{A.138})$$