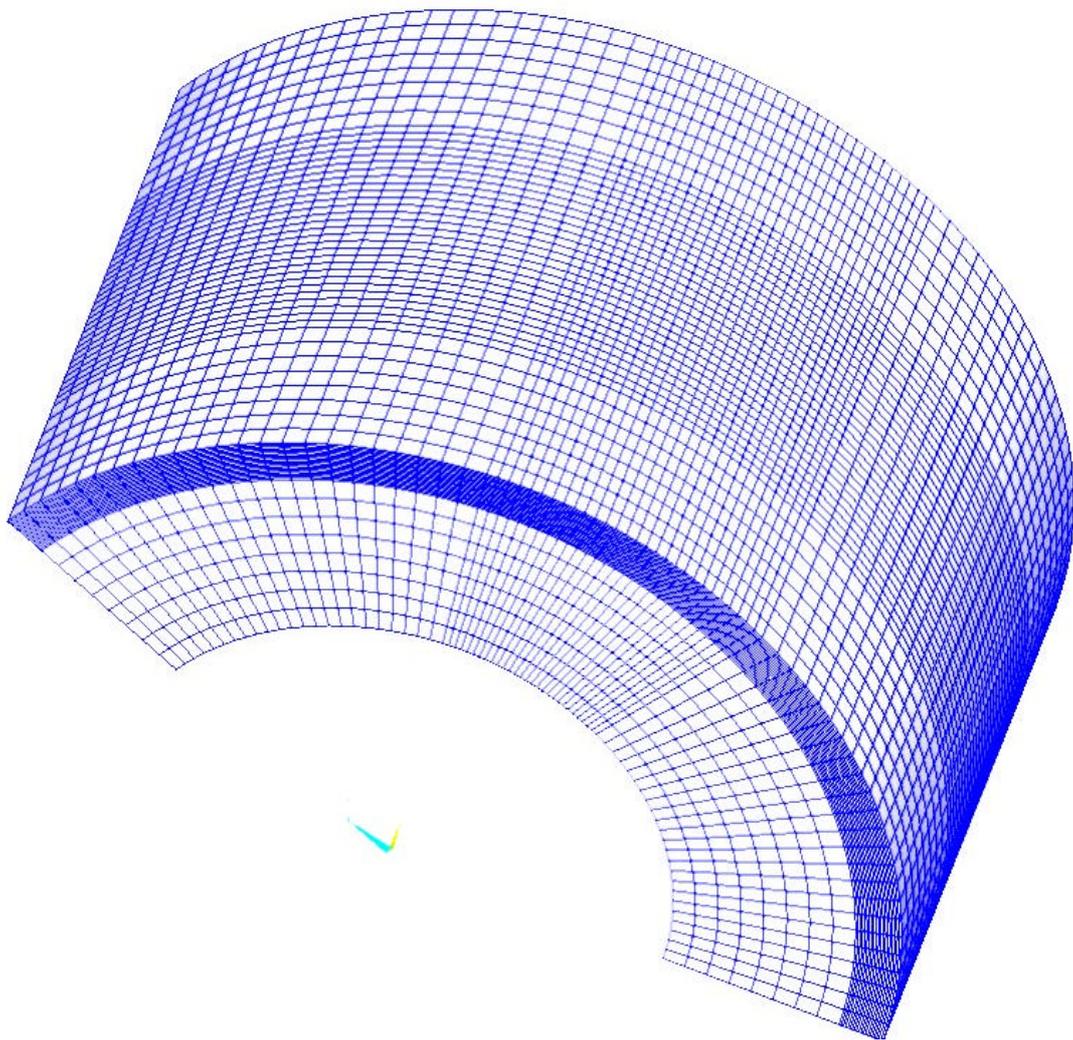


Simulación numérica de procesos de tratamiento térmico superficial de aceros con láser de potencia.

Emilio Saavedra Otero



*Dirección: Dr. D. Alberto Ramil Rego
Dr. D. Armando J. Yáñez Casal*

Contenidos

Prólogo	5
1. Objetivos	7
2. Introducción	11
2.1. Fuentes láser	13
2.1.1. Principios básicos	13
2.1.2. Propiedades de la emisión láser	20
2.1.3. Tipos de láseres	25
2.2. Interacción láser-materia	35
2.2.1. Absorción de la radiación láser	35
2.2.2. Calentamiento	37
2.2.3. Fusión	38
2.2.4. Plasma	39
2.3. Procesado de materiales con láser	43
2.3.1. Tratamientos superficiales: temple, recargamiento, refusión y limpieza	43
2.3.2. Marcado	46
2.3.3. Perforado	47
2.3.4. Corte	49
2.3.5. Soldadura	50
3. Estudio teórico del tratamiento térmico de materiales	55
3.1. Transmisión del calor	57
3.1.1. Conducción	57
3.1.2. Radiación	58
3.1.3. Convección	60
3.2. Modelos analíticos del campo de temperaturas	63
3.2.1. Flujo estacionario	64
3.2.2. Flujo dependiente del tiempo	67
3.3. Modelos numéricos: elementos finitos (FEM)	73
3.3.1. Descripción general	73
3.3.1.1. Discretización espacial	76
3.3.1.2. Criterio de convergencia	78
3.3.2. Particularización al análisis térmico	79

3.3.3. Discretización temporal	82
3.3.4. Cambios de estado y de fase	84
3.4. Transformaciones metalúrgicas en el sistema hierro-carbono	89
4. Desarrollo de un modelo de tratamiento térmico con láser	95
4.1. Modelos analíticos	97
4.1.1. Método de las imágenes	97
4.1.1.1. Geometría plana: placas	97
4.1.1.2. Geometría cilíndrica: tubos	100
4.1.1.3. Caracterización del método de las imágenes	100
4.1.2. Aplicación del método de las imágenes	114
4.1.2.1. Haz rectangular estacionario	114
4.1.2.2. Modo TEM ₀₁ * en movimiento	116
4.1.3. Análisis adimensional	118
4.2. Modelo de elementos finitos	125
4.2.1. Mallado	126
4.2.2. Geometrías	126
4.2.3. Discretización del haz	127
4.2.4. Errores introducidos con la discretización	130
4.3. Modelo de transformaciones metalúrgicas de aceros al carbono	153
4.3.1. Transformaciones de fase	153
4.3.2. Endurecimiento	159
5. Evaluación experimental	161
5.1. Diseño de los experimentos	163
5.1.1. Instrumentación	163
5.1.2. Tomas de datos	166
5.1.3. Dispositivo experimental	167
5.1.3.1. Determinación de la absortividad del acero	168
5.2. Endurecimiento superficial	171
5.2.1. Geometría Plana	172
5.2.2. Geometría cilíndrica	188
6. Conclusiones	203
Epílogo	207
Anexo	213

Prólogo

En la Historia de la Humanidad hay dos hechos que, a mi entender, son las principales causas del nivel científico-tecnológico que hoy en día disponemos. El primero de ellos hay que situarlo en la época clásica (s. VI a.C.), y sería la búsqueda por parte de la escuela pitagórica de una herramienta para explorar el universo. Esta indagación fue el germen de un incipiente lenguaje matemático junto con su aplicación a las observaciones cotidianas. El segundo, pero no por esto menos importante, la Declaración de los Derechos del Hombre y del Ciudadano (París, 1789) que reconocía en la educación un instrumento de lucha contra la opresión de las personas. La sabia conjugación entre el acceso universal a la enseñanza y el uso de una metodología científica rigurosa sustenta, en gran medida, el actual progreso tecnológico.

En mi caso la oportunidad de iniciarme y profundizar en el aprendizaje se la debo a mis padres, primeramente por inculcarme la importancia del estudio, mas también por darme la oportunidad de hacer una carrera, algo que bien sé les costó bastantes sacrificios y privaciones. Es por esto que esta Tesis está dedicada, con un profundo cariño, a mis padres, D^a. Carmen Otero Allegue y D. Emilio Saavedra Losada.

No quería acabar esta presentación sin manifestar que este trabajo de investigación no fue una labor unipersonal, sino que por el contrario, fue posible gracias a las aportaciones desinteresadas de mis compañeros. Deseo expresar mi reconocimiento a D. Alberto Ramil Rego por sus inteligentes y oportunas correcciones, así como las contribuciones de: D. Armando J. Yáñez Casal, D. J. Carlos Álvarez Feal, D^a. Josefa Sanesteban Raposo, D. José Manuel Amado Paz, D^a. María José Tobar Vidal, D^a. Ana Jesús López Díaz, D. Ginés Nicolás Costa y D. Félix Ledo Pernas; también es necesario reconocer la labor de D. José Luis Ocaña Moreno en la fundación de este grupo de investigación. La disponibilidad de los superordenadores HPC 4500 y HPC 320, así como de la licencia del programa ANSYSTM, fue por cuenta del Centro de Supercomputación de Galicia (CESGA), que tiene mi reconocimiento y gratitud. Por último, quedo en deuda con mi esposa Begoña Simal González por sus alientos, consejos y correcciones literarias.

Capítulo 1

Objetivos

1. Objetivos

La alta potencia del láser de CO₂ lo convierte en una herramienta idónea para el tratamiento de algunos materiales en la ingeniería, el temple del acero es un buen ejemplo. Al quedar sobre la probeta muy localizada la región iluminada, los resultados de la distorsión térmica son menores que con los métodos convencionales. Además, la adecuada calidad de las propiedades metalúrgicas dependerá en gran medida de una buena relación entre los parámetros del tratamiento: potencia, anchura del spot y velocidad de barrido.

La combinación entre los modelos matemáticos y las técnicas experimentales en el procesamiento con láser conforman una herramienta con la que es posible minimizar costes y predecir la naturaleza de los sistemas tratados.

Así mismo, la simulación numérica permite estimar cuantitativamente la composición de las fases, la dureza y la profundidad de penetración del tratamiento. En la bibliografía aparecen muchos modelos matemáticos desarrollados para calcular el campo de temperaturas, en el procesado con láser, bajo algunas condiciones específicas tal como geometrías semiinfinitas, propiedades térmicas constantes, etc... Con el uso de los elementos finitos (FEM) se pretende salvar estas limitaciones.

El propósito de este trabajo es el de desarrollar un modelo basado en soluciones tanto analíticas como numéricas que nos permita predecir el comportamiento de un material cuando éste es sometido a un tratamiento de temple con un láser de potencia.

Esta Tesis quedó dividida en cinco partes: una introducción, un estudio teórico del tratamiento térmico de materiales, el desarrollo de un modelo matemático propio, la descripción y análisis de dos experiencias de tratamiento de un acero y la extracción de unas conclusiones.

- Comenzaremos con una introducción de los principios físicos en los que se basa el funcionamiento de los láseres para, seguidamente, estudiar como interacciona la radiación con la materia. Continuando con la descripción de los distintos tipos de procesados que se pueden efectuar con un láser.

- La intención del tercer capítulo será la de cimentar las bases teóricas del tratamiento térmico de materiales. Así daremos cuenta de las formas que tiene el calor de transmitirse y de las soluciones analíticas de la ecuación del calor para cuatro situaciones diferenciadas: flujo estacionario y transitorio con y sin velocidad relativa fuente-material. Aparecerá también una introducción a los elementos finitos y su particularización al análisis térmico. Acabaremos con una introducción sobre las transformaciones metalúrgicas.
- En el cuarto apartado se describirá un modelo propio de tratamiento térmico con láser, que se dividió en tres partes: dos soluciones analíticas (método de las imágenes y análisis adimensional), un modelo de elementos finitos y un proceso numérico para el cálculo de las transformaciones metalúrgicas.
- En el quinto párrafo se describirá el procedimiento experimental seguido para llevar a cabo el tratamiento con láser del temple de un acero hipoeutectoide, junto con la exposición y análisis de los distintos resultados.
- Finalizaremos este trabajo enumerando unas conclusiones.

Capítulo 2

Introducción

2.1. Fuentes láser

2.1.1.Principios básicos

2.1.2.Propiedades de la emisión láser

2.1.3.Tipos de láseres

2.2. Interacción láser-materia

2.2.1.Absorción de la radiación láser

2.2.2.Calentamiento

2.2.3.Fusión

2.2.4.Plasma

2.3. Procesado de materiales con láser

2.3.1.Tratamientos superficiales: temple, recargamiento, refusión y limpieza

2.3.2.Marcado

2.3.3.Perforado

2.3.4.Corte

2.3.5.Soldadura

Antes de meterse a fondo en el tema principal de esta Tesis consideramos muy oportuno hacer una pequeña presentación sobre los láseres y sus aplicaciones. En concreto se busca introducir al lector en los principios básicos de la emisión estimulada de radiación así como en sus propiedades más significativas (monocromaticidad, coherencia espacial y temporal,...). Mismamente, por concretar, estableceremos un criterio de clasificación de los tipos de láseres y describiremos algunas de sus características y funcionamiento.

En la segunda parte de este capítulo trataremos la interacción láser-materia. Partiendo del estudio de como es absorbida la radiación en la superficie de un material y adoptando como vector descriptivo el paulatino aumento de la potencia depositada examinaremos los mecanismos físicos que explican el calentamiento de una sustancia, la fusión y la formación de plasma.

Para acabar este capítulo haremos una leve descripción de las principales aplicaciones industriales de los láseres de potencia: tratamientos superficiales, marcado, perforado, corte y soldadura.

2.1 Fuentes Láser

2.1.1 Principios Básicos

La luz, además de sus características ondulatorias, $c = \lambda \nu$ donde λ representa la longitud de onda y ν la frecuencia, tiene el comportamiento de una partícula. Cada uno de estos corpúsculos, fotones, transporta una energía igual a la constante de Planck ($h = 6.6 \times 10^{-34}$ Js) multiplicada por la frecuencia de la onda, $E = h\nu$. Mientras que en algunos experimentos, por ejemplo de interferencia, se pone de manifiesto su naturaleza ondulatoria, en otros, como la absorción de la luz por sistemas atómicos, se evidencia su esencia corpuscular.

Emisión espontánea y estimulada

La radiación electromagnética al interactuar con los átomos puede aumentar o disminuir su energía en cantidad proporcional a la frecuencia incidente, distinguiéndose tres maneras en la que esta variación se produce: absorción, fluorescencia y emisión estimulada.

En el proceso de absorción la onda electromagnética es captada por un átomo, molécula o partícula e incrementa de ese modo su nivel energético en una cantidad, $\Delta E = h\nu$. La fluorescencia consiste en una pérdida espontánea de energía de alguna de estas entidades, que se manifiesta en la emisión de un cuanto de frecuencia $\nu = \Delta E/h$. Por último, cabe la posibilidad de que la interacción entre un fotón de frecuencia ν y un átomo provoque que este último descienda de nivel emitiendo otro fotón de la misma frecuencia que la del incidente, este fenómeno se conoce como emisión estimulada (Ready, 1997).

Las reglas que rigen estas transformaciones son proporcionales al número de átomos o moléculas presentes en el nivel (ecuaciones logarítmicas), y están cuantificadas por los coeficientes de Einstein. Si representamos con $u(\nu)$ la densidad de energía por unidad de volumen en el intervalo de frecuencias que va desde ν a $\nu + d\nu$, el número de

2. Introducción

absorciones por unidad de volumen y de tiempo entre dos niveles E_i y E_j , con $E_j > E_i$ es (Thyagarajan, 1981), (Davis, 1996):

$$\frac{dN_{ij}}{dt} = -N_i B_{ij} u(\mathbf{n}) \quad [2.1]$$

Donde N_i es el número de partículas por unidad de volumen en el nivel E_i . El número de emisiones estimuladas y fluorescentes entre los niveles E_j y E_i será:

$$\frac{dN_{ji}}{dt} = -N_j B_{ji} u(\mathbf{n}) - N_j A_{ji} \quad [2.2]$$

Las cantidades B_{ij} , A_{ji} y B_{ji} son conocidas como coeficientes de Einstein, teniendo como dimensiones $M^{-1}L$, T^{-1} y $M^{-1}L$, respectivamente. En un hipotético equilibrio en el transvase entre los dos niveles se cumplirá,

$$\begin{aligned} \frac{dN_{ij}}{dt} &= \frac{dN_{ji}}{dt} \\ N_i B_{ij} u(\mathbf{n}) &= N_j A_{ji} + N_j B_{ji} u(\mathbf{n}) \end{aligned} \quad [2.3]$$

Despejando la densidad de energía

$$u(\mathbf{n}) = \frac{A_{ji}}{\frac{N_i}{N_j} B_{ij} - B_{ji}} \quad [2.4]$$

Sí consideramos que los átomos, moléculas o partículas se comportan como un gas de partículas con estados no degenerados y que siguen la estadística de Maxwell-Boltzman,

$$N_i \propto \exp\left\{-\frac{E_i}{k_B T}\right\}$$

$$\frac{N_i}{N_j} = \exp\left\{-\frac{E_i - E_j}{k_B T}\right\}$$
[2.5]

Incorporando la ecuación [2.5] en la [2.4] obtenemos una nueva expresión para la densidad de energía:

$$u(\mathbf{n}) = \frac{A_{ji}}{B_{ij} \exp\left(\frac{h\mathbf{n}}{k_B T}\right) - B_{ji}}$$
[2.6]

Por último haciendo las transformaciones oportunas y comparando con ley de Planck de radiación del cuerpo negro,

$$u(\mathbf{n}) = \frac{u(\mathbf{w})d\mathbf{w}}{d\mathbf{n}} = \frac{8p h \mathbf{n}^3}{c^3} \frac{1}{\exp\left(\frac{h\mathbf{n}}{k_B T}\right) - 1}$$

$$u(\mathbf{n}) = \frac{A_{ji}/B_{ji}}{\frac{B_{ij}}{B_{ji}} \exp\left(\frac{h\mathbf{n}}{k_B T}\right) - 1}$$

$$\left. \begin{array}{l} \\ \\ \end{array} \right\} \Rightarrow \left\{ \begin{array}{l} B_{ij} = B_{ji} \\ \frac{A_{ji}}{B_{ji}} = \frac{8p h \mathbf{n}^3}{c^3} \end{array} \right.$$
[2.7]

El primero de estos resultados establece que la probabilidad de que un átomo, molécula o partícula en un estado inferior, de entre un par de estados de energía, absorba radiación y salte al estado superior es exactamente igual a la probabilidad de que un átomo, molécula o partícula en el estado superior sea estimulado a irradiar energía y descienda al estado inferior. El segundo de los resultados nos proporciona una relación fundamental entre la emisión espontánea de radiación y la estimulada (*Marshall, 1972*).

Medio activo

Aunque el esquema de dos niveles energéticos es muy sencillo, tiene aplicaciones limitadas a contados casos de láseres (excímeros, KrF*...), empleándose más comúnmente sistemas de tres o cuatro estados.

2. Introducción

El funcionamiento de un láser de tres niveles (por ejemplo el de rubí) con $E_1 < E_2 < E_3$ consta de tres etapas:

1. Bombeo de átomos, moléculas o partículas desde el estado fundamental (E_1) hasta el nivel más excitado (E_3).
2. Transición no radioactiva hasta el nivel E_2 . La pérdida de energía ($E_3 - E_2$) se manifestará como una traslación, vibración o rotación, o de tratar con un sólido, se traducirá en un incremento de la energía de red (*Thyagarajan, 1981*).
3. Por último se producirá la transición entre el segundo y el primer nivel, emitiendo un fotón de frecuencia $\boldsymbol{n} = \frac{E_2 - E_1}{h}$

El cambio de población que experimentan los tres niveles es:

$$\begin{aligned}\frac{dN_3}{dt} &= \boldsymbol{w}_p N_1 - \boldsymbol{w}_p N_3 - A_{32} N_3 \\ \frac{dN_2}{dt} &= \boldsymbol{w}_l N_1 - \boldsymbol{w}_l N_2 + A_{32} N_3 - A_{21} N_2 \\ \frac{dN_1}{dt} &= \boldsymbol{w}_p N_3 - \boldsymbol{w}_p N_1 + \boldsymbol{w}_l N_2 - \boldsymbol{w}_l N_1 + A_{21} N_2\end{aligned}\tag{2.8}$$

donde el factor \boldsymbol{w}_p es proporcional al coeficiente de Einstein B_{13} y a la densidad de energía bombeada. De la misma manera, \boldsymbol{w}_l es proporcional a B_{12} y a la densidad de energía necesaria para el bombeo entre los niveles 1 y 2. En una situación de equilibrio estacionario,

$$\frac{dN_1}{dt} = \frac{dN_2}{dt} = \frac{dN_3}{dt} = 0\tag{2.9}$$

De la evaluación de la diferencia $\frac{N_2 - N_1}{N}$, siendo $N = N_1 + N_2 + N_3$, se deduce que para alcanzar una inversión de población, es decir, $N_2 - N_1 > 0$, es condición necesaria que $A_{32} > A_{21}$. Además, el límite para que se dé esta situación queda establecido por:

$$w_p = \frac{A_{32}A_{21}}{A_{32} - A_{21}} \quad [2.10]$$

Este esquema presenta el inconveniente de que la acumulación de átomos, moléculas o partículas en el segundo nivel, fenómeno al que se denomina inversión de población, y el consiguiente decaimiento, se ve obstaculizada por la alta ocupación del estado fundamental, por lo que necesitan de un bombeo intenso desde éste al nivel alto (*Ready, 1997*).

A diferencia con el anterior, en el láser de cuatro niveles, la emisión del fotón se produce en la transición entre las energías intermedias, evitando así la acumulación de átomos, moléculas y partículas en el nivel tres, donde se produce la inversión de población. Con este sistema se facilita la migración entre el estado fundamental y el más excitado. En este esquema de funcionamiento están los láseres más representativos: el de dióxido de carbono, el helio-neon y el Nd:YAG. Su funcionamiento consta de las siguientes cuatro etapas:

1. Bombeo de átomos, moléculas o partículas desde el estado fundamental (E_1) hasta el nivel más excitado (E_4).
2. Decaimiento no radioactivo hasta el nivel E_3 . La pérdida de energía ($E_4 - E_3$) se manifestará como una traslación, vibración o rotación, o en el caso de tratar con un sólido, incrementando la energía de red (*Thyagarajan, 1981*).
3. Transición entre el tercer y el segundo nivel emitiendo un fotón de frecuencia

$$\mathbf{n} = \frac{E_3 - E_2}{h}.$$

2. Introducción

4. Decaimiento no radioactivo entre el nivel E_2 y el fundamental. Igualmente que en el apartado dos, la pérdida de energía ($E_2 - E_1$) se manifestará como una traslación, vibración o rotación, o en el caso de tratar con un sólido, incrementando la energía de red (Thyagarajan, 1981).

El cambio de población en un sistema de cuatro niveles vendrá dado por:

$$\begin{aligned}\frac{dN_4}{dt} &= w_p N_1 - w_p N_4 - A_{43} N_4 - A_{42} N_4 - A_{41} N_4 \\ \frac{dN_3}{dt} &= w_l N_2 - w_l N_3 + A_{43} N_4 - A_{32} N_3 - A_{31} N_3 \\ \frac{dN_2}{dt} &= w_l N_3 - w_l N_2 + A_{42} N_4 + A_{32} N_3 - A_{21} N_2 \\ \frac{dN_1}{dt} &= w_p N_4 - w_p N_1 + A_{41} N_4 + A_{31} N_3 + A_{21} N_2\end{aligned}\tag{2.11}$$

Comparando la población de los estados tres y dos, asumiendo como condiciones $A_{43} \gg A_{42}$, $A_{43} \gg A_{41}$, $A_{21} \gg A_{32}$ e $w_l \approx 0$, Thyagarajan llega a la siguiente expresión:

$$\frac{N_3 - N_2}{N} \approx \frac{w_p / A_{32}}{1 + w_p / A_{32}}\tag{2.12}$$

La conclusión es que la diferencia $N_3 - N_2$ es siempre positiva, por lo que es más fácil conseguir la inversión de población que en el caso de tres niveles, algo que ya se comprobó experimentalmente (Thyagarajan, 1981).

Bombeo

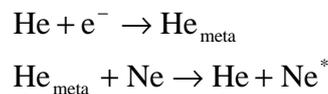
Para tener la necesaria inversión de población es necesario el uso de un mecanismo que promueva los átomos, moléculas o partículas desde el estado fundamental a uno excitado. Los distintos métodos de bombeo empleados (óptico, excitación por colisión de electrones, transferencia de energía por resonancia...), se pueden clasificar en dos tipos: directo y por transferencia (Silfvast, 1996).

Excitación por bombeo directo: consiste en el uso de un flujo excitante que eleva los átomos, moléculas o partículas directamente a un nivel energético superior. Dos ejemplos serían:

- Bombeo óptico, empleado en los láseres de rubí y Nd:YAG, implica el uso de una fuente auxiliar de luz que es absorbida por el medio activo. Dependiendo de la estructura de la fuente el láser será pulsado o continuo.
- Uso de un chorro de electrones, que al ser inyectados y golpear, excitan el medio activo hasta el nivel deseado, siendo necesaria correspondencia entre el espectro de velocidades de los electrones incidentes y la sección eficaz de los blancos.

Las desventajas más notables de estos métodos son por un lado la necesidad de una fuente apropiada que aporte exactamente la diferencia de energía entre los niveles implicados, y por el otro la posibilidad de que la transición ocurra en niveles que no son de interés para la amplificación (*Silfvast, 1996*).

Excitación por bombeo indirecto o por transferencia: en esencia consiste en la adición de componentes neutros para la emisión láser, que por transferencia energética permite alcanzar la necesaria inversión de población en el medio activo. Así en el caso de los láseres de He:Ne, mediante un flujo electrónico una de las componentes, el He, se eleva hasta el primer estado excitado. Por colisión electrónica se transferirá la energía entre niveles parejos del medio activo situándose éste en un estado resonante. (*Marshall, 1972*), (*Silfvast, 1996*).



Entre sus principales ventajas está el empleo de un interludio, He_{meta} , entre el estado fundamental y el excitado que evita la saturación y produce una selección efectiva, al aumentar la probabilidad de bombeo. En su detrimento cabe decir que es posible alcanzar un valor de saturación dependiente de la densidad de la especie neutra, donde el flujo electrónico de la misma manera que excita también decae.

2. Introducción

Resonador óptico

Por último, al lugar geométrico donde está confinada la onda que va experimentar la amplificación nos referiremos como cavidad resonante o resonador (*Bachs, 1988*). Por lo general, éste está formado por un medio activo limitado por espejos enfrentados, con su eje perpendicular a la dirección de propagación de la radiación. Para extraer la luz uno de ellos será semitransparente. La geometría de la cavidad, más larga en una dirección que en la otra, permite compensar las pérdidas por atenuación con la amplificación de la onda en el medio activo. Para la cavidad se cumple la ecuación:

$$i \frac{l}{2} = hD \quad [2.13]$$

donde i representa un entero grande ($\approx 10^5$), D es la distancia entre espejos y h el índice de refracción. El resonador tiene frecuencias propias de resonancia que interaccionan con las frecuencias del medio activo (*Davis, 1996*). Las combinaciones entre l y h que hacen que se produzca una fluorescencia se denominan modos (*Ready, 1997*).

2.1.2 Propiedades de la Emisión Láser

Hay un conjunto de propiedades que caracterizan la utilidad de los láseres y los distinguen de las fuentes de radiación convencionales. Entre las más notables están la monocromaticidad, la direccionalidad, el brillo, la coherencia y la polarización.

Monocromaticidad

La limitada anchura espectral de la radiación láser se debe al casamiento entre la curva de ganancia del material láser y las resonancias de la cavidad (*Davis, 1996*). Así cuando, debido a un salto cuántico, la radiación electromagnética es emitida con una intensidad, por ejemplo [Ec. 1.14] para una distribución gaussiana

$$I_0 \propto \exp\left\{-\ln 2 \left[2 \frac{\mathbf{n} - \mathbf{n}_0}{\Delta \mathbf{n}}\right]^2\right\} \quad [2.14]$$

Donde $\Delta \mathbf{n}$ representa la anchura de las líneas espectrales debida al corrimiento Doppler siendo proporcional a la temperatura y a la masa de estas partículas

$$\Delta \mathbf{n} = 2\mathbf{n}_0 \sqrt{\frac{2kT \ln 2}{Mc^2}} \quad [2.15]$$

Al producirse la amplificación por el medio activo se consigue que la anchura espectral disminuya, después de una interacción, la distribución [Ec. 1.14] se transformará en [Ec. 1.16], haciendo la radiación más monocromática, $\Delta \mathbf{n}' = \Delta \mathbf{n} / \sqrt{2}$ (Davis, 1996).

$$I = I_0^2 \propto \exp\left\{-\ln 2 \left[2 \frac{\mathbf{n} - \mathbf{n}_0}{\Delta \mathbf{n} / \sqrt{2}}\right]^2\right\} \quad [2.16]$$

Por otro lado hay que tener en cuenta la contribución de frecuencias que hacen los modos propios (\mathbf{n}_i) de resonancia de la cavidad láser. De [2.13],

$$\mathbf{n}_i = i \frac{c}{2hD} \quad [2.17]$$

Los métodos para alcanzar una emisión monocromática se pueden dividir en tres grupos genéricos. El primero actúa sobre la curva de ganancia, el segundo selecciona los modos resonantes, y el último filtra la radiación resultante.

- Actuación sobre la curva de ganancia. Con el uso de gases a alta presión como medios activos, se aumenta el número de interacciones fotón-partícula, consiguiendo una línea espectral muy estrecha.
- Selección de un modo resonante. Empleando una cavidad resonante lo suficientemente pequeña, ésta contendrá una única resonancia. De esta manera

al acoplarse con la curva de ganancia se producirá una única frecuencia. Este tipo de cavidad limita seriamente la potencia extraída, por lo que se emplea como semilla para otras cavidades más largas (distribución en serie).

- Filtro de las longitudes de onda. Mediante la colocación de un elemento óptico (etalón Fabry-Perot, interferómetro de Fox-Smith, película absorbente) que permita seleccionar la frecuencia deseada variando sus propiedades físicas o geométricas.

Direccionalidad

Quizás la cualidad más notable de la radiación emitida por un láser sea su alta colimación, lo que permite focalizarla fácilmente en un área muy pequeña (Ready, 1997). Esta propiedad es fruto de la rigurosa selección que se produce dentro de la cavidad resonante al atenuarse todos los fotones que no tengan su dirección de propagación alineada con el eje de los espejos.

A pesar de que la distribución del campo dentro del resonador no está formada por ondas planas, cuando se propaga se ve afectado por la difracción (Davis, 1996) (Silfvast, 1996) (Thyagarajan, 1981). Como resultado de esto aparecerá una pequeña divergencia, \mathcal{J} , dependiente de la estructura espacial del haz y de sus propiedades ópticas (longitud de onda y mínima anchura del spot, $w_0 = E_{m\acute{a}x}/e$) (Ready, 2001). Algunos autores interpretan este ángulo ϑ como una medida de la calidad óptica del láser (Ready, 2001) (Silfvast, 1996).

Una tabla bastante completa de definiciones de ángulos de divergencia está representada en el texto de Ready y Farson, donde se puede apreciar, además de las dependencias anteriormente citadas, también lo confuso de su definición al considerar una superficie, que bien podría tener forma irregular, y una cantidad de energía depositada en ella (Ready, 2001). Así, por ejemplo:

<i>Expresión</i>	<i>Descripción</i>
$J = \frac{2I}{D}$	Divergencia para un modo TEM ₀₀ con frente de onda plana que incide sobre un área cuadrada de lado D, y que contiene el 81 % de la energía total.
$J = 2.44 \frac{I}{D}$	Divergencia para un modo TEM ₀₀ con frente de onda plana que incide sobre un área circular de diámetro D, y que contiene el 84.5 % de la energía total.
$J = \frac{2I}{\omega_0}$	Divergencia del TEM ₀₀ en el campo alejado siendo ω_0 el mínimo tamaño del spot, y conteniendo el 86.5 % de la energía.

Brillo

La alta radianza es el atributo que posibilita aplicaciones del láser, por ejemplo al procesamiento de materiales. La definición de esta propiedad varía según la aplicación.

Los láseres al emitir en el interior de un pequeño ángulo sólido (direccionalidad) muestran un brillo muy alto, pero éste puede verse afectado por la presencia de varios modos electromagnéticos. Por lo general al aumentar la potencia se incrementará el número de modos, con lo que al compensarse las dos propiedades, el brillo permanece constante. Además, el brillo no se puede aumentar por medios ópticos (Ready, 1997).

Coherencia

La interacción entre el campo electromagnético de dos ondas se explica mediante los fenómenos físicos de la difracción y la interferencia (Ready, 1997) (Ready, 2001). La propiedad de la coherencia dará la medida del grado de casamiento entre una o más ondas relacionando las fases de dos puntos.

Esta propiedad, relativa al láser, se clasifica en dos categorías: coherencia temporal o longitudinal, y coherencia espacial o transversal (Davis, 1996) (Ready, 2001) (Silfvast, 1996).

- i. La longitud de coherencia temporal (L_c) implica una relación de fase entre las amplitudes del campo radiante en dos puntos que se sitúan en la dirección de propagación de la onda. Definiéndose como:

$$L_c = c T_c = \frac{c}{\Delta \mathbf{n}} \quad [2.18]$$

L_c representa la distancia máxima que la luz se propaga sin interferencias entre modos. Se observa que cuanto mayor sea esta longitud más monocromático será el haz. Además, T_c caracteriza el período de tiempo que la radiación es coherente. Ready destaca que la presencia de varios modos longitudinales, reduce la longitud de coherencia L_c (Ready, 1997).

- ii. El significado físico de la coherencia espacial (L_w) es el de la máxima distancia, medida en el plano normal al vector de onda, dentro de la cual el haz no interfiere consigo mismo. Con este enunciado de la propiedad se está relacionando la coherencia espacial con la divergencia del haz.

$$L_w = 2.44 f \frac{1}{D} = f J_r \quad [2.19.a]$$

$$L_w = 2 f \frac{1}{D} = f J_c \quad [2.19.b]$$

La primera de las expresiones [2.19.a] muestra la longitud de coherencia espacial L_w para el caso de una sección transversal rectangular y [2.19.b] para circular. f representa la distancia entre la fuente y el plano de observación y D la anchura en [2.19.a] o el diámetro, en el caso de [2.19.b], de dicha sección.

Polarización

El campo electromagnético de las ondas vibra transversalmente a la dirección de propagación. Un haz luminoso estará polarizado cuando tenga orientado el vector de campo eléctrico global.

La polarización afecta al acoplamiento entre la energía del láser y el material iluminado. El coeficiente de reflexión para un láser polarizado depende de la orientación del vector de polarización relativo a la superficie del metal. Así, el ajuste óptimo entre la luz y la superficie metálica ocurre cuando el vector de polarización de la radiación incidente es perpendicular a la superficie. Esto puede dar lugar, en el caso de un corte, a la inclinación de las superficies segadas hacia el valor de la máxima polarización (Duley, 1983).

2.1.3 Tipos de Láseres

La bibliografía consultada manifiesta una amplia gama de criterios para la clasificación de los láseres. Por ejemplo, Silfvast los distingue según la densidad del medio activo: baja densidad para los gases, y alta densidad para el estado sólido, coloides, y semiconductores (Silfvast, 1996). Dorronsoro establece los límites de distinción con los rangos de longitud de onda (Dorronsoro, 1995). Ready y Farson centrándose en la serie de los láseres comerciales, separan los continuos de los pulsados entre continuos y pulsados (Ready, 2001). Davis, sin un paradigma aparente, se limita a describir un conjunto: láseres de gas, moleculares, sintonizables y de semiconductores (Davis, 1996). Por último, algunos de los autores ya mencionados hacen una catalogación en función del medio activo (Dorronsoro, 1995) (Ready, 1997) (Ready, 2001).

i. Láseres de gases

La característica que define estos resonadores es el uso de un gas, o una mezcla de ellos, como medio activo, además de tener en común una baja absorción de radiación. En estas circunstancias el bombeo óptico es muy ineficaz, siendo excepción el cesio y los láseres moleculares. Otras cualidades son:

- a diferencia de los láseres de estado sólido, los medios activos gaseosos pueden alcanzar un volumen grande,
- el medio es homogéneo,

2. Introducción

- cabe la posibilidad de enfriar el gas.

En función del medio activo puede establecerse una subclasificación: láseres de gases neutros, de gases ionizados, moleculares, excímeros y de vapores metálicos.

1. Láseres de gases neutros

Los medios activos están compuestos por mezclas de gases neutros que emiten radiación debido a las transiciones electrónicas entre niveles energéticos. Por ejemplo, en el caso del He:Ne, una descarga eleva los átomos de helio hasta un estado excitado, transfiriendo por colisión su energía al neón. Las propiedades de la radiación producida son:

He:Ne	
Longitudes de onda, λ :	632.8 nm
Potencia:	0.5 – 35 mW
Modo:	95% TEM ₀₀
Diámetro:	0.5 – 1.5 mm
Divergencia:	1 – 2 mrad
Aplicaciones:	Lectores, alineadores, etc ...

2. Láseres de gases ionizados

Tienen por gas amplificador a un plasma que es atravesado por una corriente de descarga. Los materiales soportes del medio activo deben ser resistentes a las altas temperaturas. Algunos representantes son: Ar, Kr, He:Cd

Ar	
Longitudes de onda, λ :	514.5, 488.5, 501.7 nm
Potencia:	7 – 25 W
Modo:	TEM ₀₀
Diámetro:	0.5 – 1.5 mm
Divergencia:	0.5 – 2 mrad

3. Láseres moleculares

A diferencia de los anteriores que emplean transiciones electrónicas para el proceso de amplificación, en este tipo de láseres la radiación emana del decaimiento de los estados de vibración y/o rotación al fundamental (siendo posible tener simultáneamente las tres emisiones). Tomaremos como paradigma al láser de dióxido de carbono (2-5% CO₂, 10-60% N₂ e 40-90% He). Haciendo uso de una descarga eléctrica, DC o AC a alta frecuencia, se eleva hasta un estado excitado al nitrógeno, que por medio de transferencia indirecta comunica su energía al dióxido de carbono, que admite tres estados excitados vibracionales. Otros ejemplos son: láser de nitrógeno, de monóxido de carbono, de óxido nitroso y nítrico, agua y/o cianuro de hidrógeno.

CO₂ (continuo)

Longitudes de onda, λ : 10.6, 9.6 nm

Potencia: 3– 3000 W

Modo: TEM₀₀, TEM₀₁*

Diámetro: 6 – 20 mm

Divergencia: 1 – 3 mrad

Aplicaciones: Corte, soldadura, etc ...

4. Láseres de excímeros

Un excímero (abreviatura de dímero excitado) es una molécula formada por un átomo de un gas noble (Ar, Kr y Xe) y por un halógeno (F y Cl). El proceso radioactivo para el criptón está esquematizado en la ecuación,



Se emplean dos métodos de excitación, que dan lugar a distintas arquitectura. Por descarga eléctrica, que puede producir hasta 100 W, y por haz de electrones, que produce pulsos muy energéticos, y por ello es usado, por ejemplo, en la investigación de la fusión. En las dos situaciones la corriente de carga debe ser muy elevada y transferida a alta velocidad (10^{12} A s⁻¹), produciéndose una ganancia también elevada. Algunos ejemplos serían: KrF, ArF, XeCl e XeF.

2. Introducción

KrF*

Longitudes de onda, λ :	249 nm
Potencia:	150 W
Modo:	multimodo
Diámetro:	10 – 30 mm
Divergencia:	1 – 3 mrad
Aplicaciones:	Medicina, fotolitografía, etc...

5. Láseres de vapor metálico

Se trata de láseres iónicos para los que la transición láser ocurre entre estados iónicos de elementos metálicos o semiconductores. Para el proceso de excitación se emplean colisiones de helio o neón. Son ejemplos los vapores de: cobre, oro, cadmio, selenio, telurio, yodo, argón, cinc, plomo estaño, mercurio y plata

Cu_v

Longitudes de onda, λ :	511, 578 nm
Potencia:	20 – 100 W
Modo:	TEM ₀₀
Diámetro:	20 – 25 mm
Divergencia:	4 – 8 mrad
Aplicaciones:	Procesado de materiales

ii Láseres de estado sólido

La cualidad que permite clasificar un láser en este apartado es la presentación del medio activo en forma de sólido transparente o translúcido. La mayor parte de ellos radian al producir un decaimiento entre estados electrónicos, no obstante existen excepciones, como el láser de alejandrita (Cr³⁺:BeAl₂O₄) con emisiones debido a la transición entre un estado vibracional y el fundamental. El método de bombeo es siempre óptico con lámparas de xenón o criptón, o haciendo uso de otros resonadores. Una característica relevante que condiciona el diseño tecnológico es la conductividad térmica del sólido. También es común a todos los amplificadores la emisión de uno o varios modos

transversales electromagnéticos. Dos de los más representativos, por causas dispares, son el láser de rubí y el neodimio-yag.

1. Rubí

Fue el primer láser. Su medio activo es un cristal de óxido de aluminio dopado con un 0.05% de cromo ($\text{Cr}^{3+}\text{Al}_2\text{O}_3$). Emite por medio de transiciones electrónicas en un sistema de tres niveles. El método de bombeo es una lámpara “flash” que emite longitudes de onda de 694.3 nm.

2. Nd:YAG

El medio activo está formado por un granate de itrio dopado con neodimio ($\text{Nd:Y}_3\text{Al}_5\text{O}_{12}$). Entre sus características más importantes están: la estabilidad, la isotropía, una alta conductividad térmica y además se puede pulir, alcanzando óptimas propiedades ópticas. El proceso de amplificación lo clasifica como un láser de cuatro niveles. Los métodos de bombeo empleados condicionan el modo de radiación, así, una iluminación con “flash” de Xe ou Kr emite en forma de pulso, mientras que para obtener un modo continuo se usa un arco de los mismos elementos. La longitud de onda está próxima a los 1064 nm. La alta conductividad térmica del cristal permite la disipación de la energía que no procede del proceso de emisión estimulada, en forma de fonones.

Una de las cualidades de este tipo de láser es que el haz producido puede conducirse a través de una fibra óptica. De ahí que el campo de aplicaciones de estas fuentes sea muy amplio dentro del procesado de materiales, aplicaciones científicas y/o médicas.

3. Otros láseres de estado sólido

Hay un buen número de medios activos semejantes en su composición al neodimio-yag. Mencionaremos algunos de ellos y sus características diferenciadoras.

2. Introducción

- Neodimio-vidrio. Es una excepción dentro de los láseres de estado sólido, ya que tiene la ventaja de poder fabricarse en la forma, tamaño y calidad óptica que se requieran.
- Nd:YLF (Nd:YLiF₄). Se trata de un cristal de tetrafluoruro de litio e itrio dopado con neodimio.
- Alejandrita. (Cr³⁺:BeAl₂O₄). Por otras razones también es una excepción en este grupo. Como ya se mencionó emite radiación por la transición entre un estado vibracional y el fundamental y presenta unas longitudes de onda entre 700 y 820 nm.
- Zafiro dopado con titanio (Ti:Al₂O₃). Emite en un rango muy amplio, entre 660 y 1880 nm.

La lista se extiende con una variedad amplia de cristales, algunos de ellos dopados con tierras raras: Cr:LiSAF (Cr:LiSrAlF), Cr:LiCAF (Cr:LiCaAlF), Nd:YVO₄, Tm:YAG, Ho:YAG, Er:YAG...

iii Láseres de semiconductores

Los láseres de semiconductores se consideran un grupo diferenciado al de los de estado sólido por sus aplicaciones y su menor tamaño. Como característica común comparten el funcionamiento en modo continuo y con bombeo eléctrico.

Cuando los átomos se sitúan muy próximos unos a otros los niveles de energía degeneran en una banda. Una banda de valencia es el nivel energético más alto ocupado por un conjunto de electrones. Al siguiente nivel accesible se le denomina banda de conducción. Entre ellas media un “gap” de energía, de tal manera que, si un fotón incide sobre la banda de valencia, con una energía mayor que el salto, un electrón promocionará su estado hasta la banda de conducción, dejando un hueco libre. Análogamente un electrón en la banda de conducción puede decaer hacia la banda de valencia y al hacerlo emitirá un fotón con energía igual a la separación entre bandas.

Un semiconductor tipo N se caracteriza por tener electrones libres, por el contrario en uno tipo P la conductividad procede, principalmente, de la movilidad de las cargas positivas. Es factible modificar el estado electrónico de un material con el dopaje adecuado. Así el arseniuro de galio, que es neutro, dopado con silicio o germanio se transformará en un semiconductor tipo N, mientras que si los aditivos son el cinc o el cadmio se convertirá en tipo P.

El medio activo en un láser semiconductor está constituido por un diodo, unión P-N, donde la banda de valencia del semiconductor tipo N está muy próxima a la banda de conducción del tipo P. Al aplicarle un voltaje V polarizado en la unión, se producirá una emigración de electrones desde la región N a la P. Cuando los electrones en la banda de conducción P caen hacia la banda de valencia N emiten fotones con una energía igual al salto que separa las dos bandas. La radiación emitida presenta ángulos de divergencia diferentes para la dirección paralela a la unión P-N, eje lento (8° FWHM), y para la perpendicular, eje rápido (35° FWHM) (*Ready, 2001*),

$$I = \frac{c}{n} = \frac{hc}{eV} \quad [2.20]$$

Los láseres de diodo pueden clasificarse en homounión o heterounión.

- En la homounión está presente el mismo material para el semiconductor tipo N y para el P.
- La heterounión se forma por la alternancia de distintos semiconductores y, como ventajas, hay que subrayar la mayor ganancia óptica y el hecho de que la diferencia en los índices de refracción produzca un efecto de guía de ondas.

Algunos ejemplos de láseres semiconductores y sus longitudes de onda son (*Ready, 1997*):

2. Introducción

<i>Semiconductor</i>	<i>λ</i> (nm)
$\text{Al}_{1-x}\text{Ga}_x\text{As}$	780 – 880
$\text{In}_{1-x}\text{Ga}_x\text{As}_{1-y}\text{P}_y$	1150 – 1650
$\text{Al}_x\text{Ga}_y\text{In}_{1-x-y}\text{P}$	630 – 680
$\text{In}_{1-x}\text{Ga}_x\text{As}$	980
$\text{Pb}_{1-x}\text{Sn}_x\text{Se}$	8000 – 12500
PbSe	8000
$\text{Pb}_{1-x}\text{Eu}_x\text{Se}$	3500- 8000

Aunque su aplicación más extendida está dentro de las comunicaciones con fibras ópticas, su simplicidad y versatilidad permitió su incorporación en las tecnologías domésticas como los lectores, de discos compactos o códigos de barras, o en las impresoras. Hoy en día existen agrupaciones de diodos con los que se consiguen aplicaciones de potencia (corte, soldadura, etc.).

iv. Otros

Hay algunas variedades de láseres que no se enmarcan dentro de los anteriores apartados: láseres de coloides, de electrones libres, de rayos X, ultravioleta... . De entre todos ellos describiremos únicamente dos.

1. Láseres de coloides

Estos láseres emplean soluciones líquidas de baja concentración de complejos orgánicos coloides muy extensos, por ejemplo $\text{C}_{26}\text{H}_{27}\text{N}_2\text{O}_3\text{Cl}$. El método de bombeo se puede efectuar tanto con “flash” como con otros láseres siendo el mecanismo de amplificación una transición vibracional. Una de las características identificativas de estos resonadores es la posibilidad de sintonizar la longitud de onda con un rango de 400 a 900 nanómetros (320 a 1200 nm según otros autores). Su rendimiento está entre un 20 y un 40%.

Este tipo de láseres tiene aplicaciones en espectroscopia, disociación molecular, separación de isótopos y reacciones químicas.

2. Láseres de electrones libres

En este tipo de resonadores no existe un medio activo que necesite de una inversión de población constando, únicamente, de un haz de electrones relativistas (su velocidad está próxima a la de la luz) que transforman en parte, o en su totalidad, su energía cinética en fotones. Los procesos físicos que intervienen son dos:

- “Bremsstrahlung” o emisión espontánea de radiación de frenado,
- Radiación Cerenkov, emitida al pasar los electrones por un medio y superar la velocidad de la luz en él.

Las ventajas de estos láseres están en el rango ilimitado de longitudes de onda y en la ausencia de deterioro del medio activo.

Bibliografía

- Bachs, L., J. Cuesta, N. Carles (1988); *Aplicaciones industriales del láser*; Productiva.
- Davis, C. C. (1996); *Lasers and electro-optics*; Cambridge.
- Dorransoro, M. (1995); *La tecnología láser. Fundamentos, aplicaciones y tendencias*; McGraw-Hill.
- Duley, W.W. (1983); *Laser processing and analysis of materials*; Plenum.
- Marshall, S.L. (1972); *Láser: tecnología y aplicaciones*; Reverté.
- Ready, J.F.(1997); *Industrial applications of laser, 2nd Ed.*; Academic Press.
- Ready, J.F. & D.F. Farson (2001); *LIA handbook of laser materials processing. Laser*; Institute of America. Magnolia Publishing, Inc.
- Silfvast, W.T.(1996); *Laser fundamentals*. Cambridge University Press.
- Thyagarajan, K., A.K. Ghatak (1981); *Lasers. Theory and applications*; Plenum Press.

2.2 Interacción láser-materia

2.2.1 Absorción de la radiación láser

Cuando la radiación emitida por un láser alcanza un material, una parte de ella se pierde por reflexión, otra cantidad es absorbida en la superficie y una última porción de la onda luminosa se transmite hacia dentro. Si R y n representan, respectivamente, la reflectividad y el índice de refracción de la sustancia, entonces la fracción de luz que no se refleja es:

$$\mathbf{e} = 1 - R = \frac{4n}{(n+1)^2} \quad [2.21]$$

A \mathbf{e} , que en su expresión más general es complejo ($\mathbf{e} = \mathbf{e}_1 + i\mathbf{e}_2$), se le denomina función dieléctrica (von Allmen, 1995) (Duley, 1983). La porción de radiación electromagnética que penetra en el material se atenúa según la ecuación de Beer-Lambert,

$$\mathbf{a} = -\frac{1}{I} \frac{dI}{dz} \quad [2.22]$$
$$I = I_0 \exp\{-\mathbf{a} z\}$$

siendo \mathbf{a} el coeficiente de absorción e I la intensidad de la radiación que incide en la superficie. Este coeficiente es una función de variables tales como la naturaleza de la propia superficie (nivel de oxidación, temperatura superficial...), de la intensidad de la luz (densidad de potencia, ángulo de incidencia, posición focal relativa al material...), y de la longitud de onda (Frewin, 1999) (Steen, 1998).

La radiación que incide sobre un material actúa modificando las propiedades ópticas del sustrato, siendo tres los mecanismos físicos responsables de estas variaciones (von Allmen, 1995):

- Calentamiento y alteración de la densidad y características electrónicas.

- Liberación de portadores de carga.
- Distorsión no lineal de los orbitales electrónicos o moleculares.

Cabe subrayar que algún autor hace una clasificación de estos procesos físicos en función de la intensidad suministrada al material. Por ejemplo, para Bamberger primero aparecería un aumento de temperatura y a continuación la fusión, la vaporización y la formación de plasma (*Bamberger, 1999*).

La radiación láser actúa de distintas maneras según el tipo de material que ilumine. La respuesta óptica en un metal está dominada por la presencia de los electrones libres con energía próxima al nivel de Fermi. La función dieléctrica tiene la forma

$$\mathbf{e} = 1 + \mathbf{w}_0^2 \frac{-\mathbf{t}_e^2 + i\mathbf{t}_e/\mathbf{w}}{1 + \mathbf{w}^2\mathbf{t}_e^2} \quad [2.23]$$

donde \mathbf{t}_e representa el tiempo medio entre colisiones y \mathbf{w}_0 la frecuencia de plasma electrónico (*von Allmen, 1995*). Duley describe la dependencia con la temperatura de esta función en el caso particular de un acero iluminado con un láser de dióxido de carbono (*Duley, 1983*):

$$\mathbf{e}(10.6 \mu\text{m}) = 11.2[\mathbf{r}(1 + \mathbf{g}T)]^{1/2} - 62.9[\mathbf{r}(1 + \mathbf{g}T)] + 174[\mathbf{r}(1 + \mathbf{g}T)]^{3/2} \quad [2.24]$$

donde \mathbf{r} representa la resistividad del material a una temperatura de 20 °C, y \mathbf{g} es el coeficiente de variación de la resistividad con la temperatura.

En las sustancias no-metálicas los electrones, ligados a un núcleo, oscilan alrededor de un punto. La función dieléctrica es el resultado de superponer la vibración atómica y el campo eléctrico de la onda incidente.

$$\mathbf{e} = 1 + \frac{N_e e^2}{m_e \mathbf{e}_0} f_{osc} \frac{\mathbf{w}^2 - \mathbf{w}_0^2 + i\Gamma\mathbf{w}}{(\mathbf{w}^2 - \mathbf{w}_0^2)^2 - \Gamma^2\mathbf{w}^2} \quad [2.25]$$

donde f_{osc} representa la fuerza de oscilación, G el amortiguamiento, ω_0 la frecuencia de los electrones ligados y ω la frecuencia de la onda incidente. Para un fonón la expresión de la función dieléctrica es igual a [2.25] sustituyendo la masa y el amortiguamiento propio del fonón (*von Allmen, 1995*).

Una situación excepcional se da cuando la irradiación a la que se somete un no-metal es suficiente para generar portadores de carga libres de sus ligaduras. Éstos, al chocar con la red, liberan a otros portadores, lo cual produce una avalancha.

2.2.2 Calentamiento

Cuando un fotón incide sobre una sustancia y su frecuencia no coincide con la de resonancia de las partículas que forman el material, es absorbido y en dicho proceso aumenta bien la energía cinética en el caso de partículas libres, bien la energía de excitación, si se tratara de un corpúsculo ligado mediante un enlace.

El mecanismo físico que aumenta la temperatura de un cuerpo transcurre por tres estadios o etapas. Primero se transformará la energía de la luz incidente en movimiento de los corpúsculos que constituyen el material. En la segunda fase se evidencia un gran número de choques entre las partículas, con tiempos medios entre colisiones incluso más pequeños que el de un pulso láser, y como consecuencia se producirá la equipartición de la energía. El tercer lapso consiste en el flujo del calor entre regiones de distinta temperatura.

En la bibliografía existente sobre la materia aparecen descritos varios métodos para medir la transformación de la radiación en calor. Steen los clasifica en tres (*Steen, 1998*):

- Método calorimétrico. Consiste en la irradiación de una probeta y la consiguiente medición de la temperatura que estará en función de la potencia del láser, del ángulo de incidencia, de la duración de la iluminación, de la temperatura inicial del material...

- Método analítico. Como su nombre indica, se trata de la resolución de la ecuación de transferencia calorífica.
- Solución inversa. Una vez medida la distribución de temperaturas, se empleará como dato de entrada en un programa numérico que estimará la energía inicial puesta en juego. Cuanto más se aproxime este resultado a los parámetros del proceso, conocidos con anterioridad, más exacta será la medición de la energía que se acopla a la sustancia.

2.2.3 Fusión

Si la energía con la que se irradia una sustancia I_0 alcanza un valor lo suficientemente alto, dicha energía debilitará las uniones entre las partículas. En este instante se formará en la cercanía de la región con valores próximos a la temperatura de fusión T_m una zona con material líquido. Si el aporte de energía es continuado la frontera del fundente se expansionará con una velocidad relativa al sustrato

$$v_m = \frac{e I_0}{l_m + r c T_m} \exp \left\{ -\frac{v_m A}{a} \right\} \quad [2.26]$$

donde l_m es el calor latente de fusión dividido por la densidad, r la densidad, c la capacidad calorífica, A la profundidad de la colada y a el coeficiente de difusión (Steen, 1998) (Duley, 1983).

La fusión de una parte de la superficie, una vez fría, deja una traza en forma de ondulaciones fruto de la interferencia entre la luz del láser y la radiación dispersa. Incluso al interferir los propios campos dispersos entre sí, se producen arrugas, de modo que el modelo resultante se comporta como una serie de Fourier de las frecuencias espaciales. Además, una vez que estas ondas quedan impresas pueden perpetuarse solapándose las anteriores con sus descendientes. En el caso de los líquidos estas deformaciones provocan tensiones superficiales que expulsan el fluido hacia regiones más frías (von Allmen, 1995).

2.2.4 Plasma

Al aumentar progresivamente la temperatura de un gas, se alcanzará un valor para el que la energía térmica superará las fuerzas que mantienen ligado el electrón al núcleo atómico. En este instante la sustancia formada por iones y electrones, no es ni sólido, ni líquido, ni gas, sino que se trata de un plasma (*Dendy, 1993*).

El plasma juega un papel importante en el acoplamiento de la energía aportada por el haz láser y los metales tratados. Autores como von Allmen, Bamberger, Duley o Stümer clasifican en tres los regímenes de intensidad incidente (*von Allmen, 1995*) (*Bamberger, 1999*) (*Duley, 1983*):

- Entre $10^3 - 10^6$ W/cm². Con valores bajos de intensidad se forma un vapor metálico tenue y transparente. Gradualmente, según aumenta el flujo, el gas evoluciona hacia la sobresaturación, apareciendo pequeñas gotas que absorben y dispersan la radiación. La nube gaseosa tiene un índice de refracción distinto al del entorno, lo que provoca la distorsión del frente de onda.
- Entre $10^7 - 10^{10}$ W/cm². La formación del plasma se extiende con velocidad supersónica, protegiendo la superficie al absorber una porción sustancial de la energía incidente. Al mismo tiempo, este plasma emite radiación que es absorbida más eficientemente que la del láser. La producción de plasma sigue la ecuación de Saha (*Steen, 1998*).

$$\ln\left(\frac{N_i}{N_0}\right)^2 = -5040\left[\frac{V_i}{T}\right] + 1.5\ln(T + 15.385) \quad [2.27]$$

donde N_0 es la densidad de átomos, N_i la densidad de ionización, V_i el potencial de ionización y T la temperatura absoluta.

- Más de 10^9 W/cm². El plasma, al alcanzar altas temperaturas, se vuelve transparente, permitiendo de ese modo que el metal esté sometido tanto a la radiación incidente como a la del plasma. Aparecen regímenes turbulentos.

2. Introducción

En el tratamiento de semiconductores la presencia de plasma afecta a la fuerza de ligadura electrones-red, alterando la frecuencia del fonón emitido, que es sensiblemente menor. Esto incrementa el número de fonones que se pueden excitar, lo que desestabiliza a la red. También puede observarse la formación de microplasma en aislantes (*von Allmen, 1995*).

Bibliografía

- Von Allmen, M., A. Blatter (1995); *Laser-beam interactions with materials*, 2nd Ed.; Springer.
- Bamberger, M. (1999); *On energy coupling between laser radiation and materials*; Lasers in Engineering, Vol. 9, pp. 139-156.
- Dendy, R. (1993); *Plasma physics*; Cambridge.
- Duley, W.W. (1983); *Laser processing and analysis of materials*; Plenum.
- Frewin, M.R., D.A. Scott (1999); *Finite element model of pulsed laser welding*; Welding Research Supplement. January, pp. 15-22.
- Steen, W.M. (1998); *Laser material processing*, 2nd Ed.; Springer.
- Thyagarajan, K., A.K. Ghatak (1981); *Lasers. Theory and applications*; Plenum Press.

2.3 Procesado de materiales con láser

El láser compite con otras herramientas por su rapidez, flexibilidad y calidad en los mecanizados: las distorsiones producidas sobre el material que se manufactura son muy pequeñas, lo que reduce el proceso de acabado de la pieza tratada (Koai, 1993) (Steen, 1998).

2.3.1 Tratamientos superficiales: temple, recargamiento, refusión y limpieza

Los tratamientos superficiales con láser permiten variar de una manera eficaz la estructura, la composición y las propiedades de las capas más externas de los materiales. Esto tiene una gran importancia si consideramos que los nuevos materiales metálicos, necesarios para el desarrollo tecnológico, necesitan de un compromiso entre unas propiedades generales y otras específicas en la superficie (Ceballos, 1998).

La familia de procesos que engloban estos tratamientos comprende el temple, la recarga, la refusión y la limpieza. No existe un criterio para decidir cual es el tipo de láser más apropiado para cada proceso. Quizás el de uso más extendido en la industria sea el resonador de CO₂, dada su buena eficiencia, aunque que también compite la facilidad de transmitir el haz vía una fibra óptica que aporta el Nd:YAG (Ready, 2001).

Temple

Es bien conocido desde la antigüedad que los metales se pueden endurecer al ser tratados primero con calor para, posteriormente, ser enfriados rápidamente. Quizás el caso más estudiado y el de uso más extendido, es el temple del acero. La mutación metalúrgica se da cuando la ferrita –cristal dominante en este metal a temperatura ambiente-, que posee una estructura de red cúbica centrada en el cuerpo BCC, se transforma en austenita, FCC, por la acción del calor, y si el enfriamiento es lo suficientemente rápido, muda a martensita, BCT.

El beneficio más significativo del procesado con láser consiste en que permite tratar únicamente una parte muy localizada de una superficie, alterando su microestructura hasta aportarle propiedades diferenciadas de las del resto del volumen. Así, el exterior

2. Introducción

de la pieza puede alcanzar resistencia a la corrosión, a la fatiga o al deterioro, mientras que el resto del material permanece con las propiedades originarias (*Labudovic, 1999*) (*Steen, 1998*). Otra cualidad provechosa es la rapidez de los ciclos térmicos y la consiguiente limitación de la difusión del carbono, de ahí que la profundidad del tratamiento sea muy reducida y el temple quede uniforme (*von Allmen, 1995*). Este tratamiento maneja variables adicionales a las del procesado con láser, como son la absorptividad, la longitud de onda y el control de la intensidad (*Koai, 1993*).

Otras características que hacen del láser una herramienta atractiva para aplicaciones de temple son (*Duley, 1983*) (*Steen, 1998*):

- Los tratamientos hacen uso de poco flujo energético, minimizando el deterioro de la pieza tratada.
- Los ciclos térmicos son rápidos, lo que hace disminuir la oxidación.
- Creación de un único patrón
- Se puede aplicar sobre una gran variedad de piezas pequeñas y estrechas.
- El rango de empleo abarca las composiciones complejas.

Por último, cabe recordar que para alcanzar el temple de áreas extensas se emplean varios métodos. Una oscilación rápida del haz en la dirección perpendicular a su movimiento iluminaría un área en forma de banda. Otros mecanismos son: la desfocalización del haz y el empleo de un espejo integrador (*von Allmen, 1995*) (*Steen, 1998*).

Recargamiento

La operación del recargamiento consiste en ligar un aporte sobre un sustrato, sin que haya disolución. Este material de recubrimiento, que puede presentarse en forma de tiras

o en polvos, tiene como función tanto la ampliación de la vida media de la pieza tratada como el aumento de su resistencia al deterioro.

Esquemáticamente podemos decir que el proceso de recargamiento consta de dos etapas: fusión de la superficie del material base y aplicación del recubrimiento.

El recargamiento con láser aporta, entre otros: una mayor ligadura entre el material agregado y el sustrato, la formación de poros más pequeños y homogeneidad en el recubrimiento. Por último hay que destacar que el uso del láser para el recargamiento evitar trabajar con una atmósfera específica, como es el caso de la proyección con plasma (*Ready, 2001*).

Refusión

Empleada como una operación adicional al recargamiento, el tratamiento de la refusión consiste en la aplicación de un nuevo flujo calorífico al sustrato recubierto, hasta alcanzar la fusión del material de aporte. Se consigue así disminuir la porosidad, homogeneizando la ligadura en el seno del material de recubrimiento.

En el proceso de refusión hay dos parámetros adicionales a los tratamientos con láser que determinarán la estructura resultante: la composición de la colada y la velocidad de propagación de la interfase sólido-líquido.

Limpieza

Con el término de limpieza con láser uno puede referirse a dos operaciones distintas: por un lado estaría la remoción de un recubrimiento –consistente en la eliminación de una capa superficial que cubre un sustrato-, y por el otro, la descontaminación de un área –que se fundamenta en la eliminación de las impurezas de una sustancia (*Ready, 2001*).

Los mecanismos físicos responsables de la remoción se clasifican en tres categorías: vaporización explosiva, excitación acústica y fotodescomposición (*Ready, 2001*) (*Park, 1994*)

2. Introducción

- La vaporización explosiva, es el resultado de la actuación de pulsos cortos e intensos sobre una película estrecha del material que se quiere eliminar. El flujo energético de estos pulsos no debería alcanzar valores de fusión del sustrato.
- La excitación acústica se produce como consecuencia de una rápida expansión y contracción térmica en la superficie. Tanto la amplitud de la vibración como la frecuencia temporal son muy pequeñas, lo que da lugar a una aceleración muy fuerte, aproximadamente del orden de 10^{10} cm/s², causando a su vez la proyección de las partículas hacia afuera de la superficie.
- La fotodescomposición se basa en la absorción selectiva de la radiación. Si el sustrato y el recubrimiento tienen distintas absorptividades para la irradiación láser, la iluminación con un haz puede disociar las ligaduras que unen las partículas del agregado.

Son varios los métodos empleados para llevar a cabo una limpieza con láser (*Dahotre, 1998*) (*Gaspar, 2000*):

- Evaporación selectiva.
- Remoción con ondas de choque.
- Limpieza en seco.
- Limpieza húmeda, por expansión térmica del vapor.
- Limpieza como resultado de las diferencias térmicas.

2.3.2 Marcado

El marcado con láser es un proceso superficial pero, a diferencia de los anteriores, sólo es necesario perforar levemente. La energía depositada por un pulso láser debe evaporar una porción de la superficie; una vez resolidificada, quedará patente una señal con

forma de cráter poco profundo. Combinando adecuadamente las marcas se formará la composición deseada. Igual que en el anterior apartado los láseres que más aparecen en este tratamiento son los de CO₂ y de Nd:YAG.

Existen varias técnicas de marcado.

- El marcado con matriz se basa en la descomposición en puntos de la imagen que se desea imprimir.
- La grabación vectorial, en lugar de emplear pulsos láser, trabaja en continuo, construyendo la imagen por medio de líneas.
- La proyección con máscara hace uso de una pantalla donde está recortada una silueta. Al interponer esta máscara entre el láser y la pieza iluminada, quedará registrado el perfil de la figura.

Entre las ventajas que se consiguen al emplear un láser para el marcado están:

- Alta resolución en las figuras.
- Procesado rápido y sin contacto.
- Fácil generación de secuencias de marcas.

No obstante, existen ciertas desventajas. Cabe destacar que no es posible aportar color a las marcas (*Ready, 2001*).

2.3.3 Perforado

Hay una característica particular que distingue el perforado de los otros procesos aquí tratados: se ejecuta sin que haya velocidad relativa haz-pieza.

El método de perforado de una sustancia con un láser es bastante simple: el material sólido iluminado absorberá energía hasta que es vaporizado. Para ciertos materiales no-metálicos, como los polímeros, la absorción de los fotones puede romper las ligaduras entre moléculas. A este fenómeno se le denomina fotofragmentación (*Ready, 2001*).

En el perforado de sustancias metálicas con láser se emplean pulsos cortos, pero con intensidad suficiente como para transformar en vapor un fragmento de la superficie; repitiendo el proceso sobre la misma área vaporizada se consigue un agujero. La forma del taladro dependerá de las inhomogeneidades que presente el sustrato en su composición. Además de esto, todos los orificios tienen forma cóncava, es decir, su diámetro es mayor en la entrada, estrechándose según gana fondo, hasta alcanzar el límite de profundidad. Este fenómeno se explica por las reflexiones del haz contra las paredes del propio taladro (*Ready, 1997*) (*von Allmen, 1995*).

Para la obtención de agujeros con diámetros mucho mayores que el del haz, se emplea la técnica del trepanado, consistente en el corte del perímetro de un área.

Las características más destacadas que debe tener un láser para poder agujerear un material son por un lado emitir pulsos (cortos mejor que largos) y por el otra una alta irradianza (*Ready, 2001*). En la Industria el más empleado es el resonador de Nd:YAG (con duraciones del pulso de entre 0.5-10 ms y potencia del orden de kilowatts). También merece mención el láser de CO₂ pulsado.

El perforado con láser ofrece un conjunto de ventajas e inconvenientes. Entre las primeras destacan (*Ready, 1997*):

- Se trata de un proceso que es fácilmente automatizable.
- No hay desgaste de herramienta.
- Es compatible con una gran variedad de materiales.

- Al no haber contacto, por un lado se reduce la posibilidad de ruptura de la pieza y por otro no se produce contaminación del material.
- La zona afectada en los alrededores del orificio es muy pequeña.

Cuenta asimismo con ciertas desventajas como:

- una profundidad de penetración limitada, que es consecuencia de la cantidad de energía disponible para cada pulso.
- escasa calidad del agujero, ya que aparecen defectos como arrugas en sus paredes o el desplazamiento de su centro.
- Frecuente formación de un cráter alrededor de la entrada del taladro debido a la recondensación. La eliminación de este sedimento requerirá de un postprocesado.

2.3.4 Corte

Esta operación consiste en separar de una pieza, uno o varios segmentos. La energía que deposita el láser debe ser suficiente para fundir el material iluminado y expulsarlo, quedando patente un canal. Es normal que la remoción de material se haga por medio de una corriente de gas.

Los diversos procesos de corte con láser se definen de acuerdo con la transformación física dominante. En sentido creciente del consumo de energía estarían: corte por oxidación, corte por fusión y corte por vaporización (*Ready, 2001*).

- Oxicorte. En este método hay aporte de oxígeno coaxialmente con el haz láser, con un doble cometido, por un lado quemar la sustancia que está siendo iluminada, y por otro vaciar el canal. Debido a la presencia en exceso de oxígeno se consume menos energía que en los restantes métodos.

- Corte por fusión. La inyección de un gas inerte - los más comunes son el nitrógeno y el argón - permite evacuar el volumen de material fundido. Este gas de aporte tiene como función secundaria la de proteger el corte contra la oxidación.
- Corte por vaporización. Se trata del método más costoso desde el punto de vista energético. La formación del canal se debe exclusivamente a la evaporación de la masa que cubre el futuro perfil de corte.

En el caso de algunos materiales no-metálicos también existe la posibilidad de que la iluminación con láser degrade los enlaces intermoleculares, provocando una fractura.

Un parámetro que influye en la calidad del corte es la polarización. En el caso de radiación láser con polarización lineal, se consigue un corte óptimo cuando la polarización es paralela a la dirección de movimiento del haz láser (*Ready, 1997*).

La aplicación más extendida de este tratamiento consiste en el corte de láminas metálicas con láser de CO₂. Este tipo de resonador tiene a su favor una buena eficiencia, el que es posible alcanzar altas potencias y el buen control que se puede establecer tanto en continuo como en modo pulsado. Para aplicaciones de gran precisión se emplean los láseres de Nd:YAG (*Ready, 2001*).

2.3.5 Soldadura

En la soldadura con láser el haz luminoso debe aportar la suficiente densidad de potencia como para fundir una porción de material; una vez cortado el abastecimiento energético, la sustancia fundente se resolidificará formando un cordón de soldadura.

Tres son los métodos de soldadura con láser (*Ready, 2001*):

- Modo conducción. Para bajas densidades de potencia, el metal fundido formará una charca, pero sin llegar a generarse un agujero.

- Modo penetración. Para flujos energéticos intermedios, se formará una colada en la superficie, que irá ganado volumen al profundizar el fundente.
- Modo “keyhole”. Cuando se ilumina una sustancia con una potencia menor de 1 kW y una focal suficientemente pequeña, se fundirá el área irradiada, y por efecto de las diferencias en la tensión superficial, esta área se deformará hasta crear un orificio en el seno de la colada. Las paredes de este taladro, denominado “keyhole”, modificarán la trayectoria del rayo hacia su interior, provocando que gane en profundidad. Al mismo tiempo se producirá un equilibrio entre la energía absorbida por las paredes de material fundente y la disipada por conducción.

Para tratamientos de soldadura no tiene relevancia la longitud de onda de la luz emitida, mas si la potencia del láser. Tradicionalmente dos son los tipos de láseres de uso más extendido: Nd:YAG (con potencias de hasta 6 kW) y CO2 (con potencia, en continuo, de hasta 50 kW) (*Ready, 2001*).

Bibliografía

- von Allmen, M., A. Blatter (1995); *Laser-beam interactions with materials 2nd Ed.*; Springer.
- Bamberger, M. (1999); *On energy coupling between laser radiation and materials*; Lasers in Engineering, Vol. 9, pp. 139-156.
- Callister, W.D.; *Ciencia e ingeniería de los materiales*; Ed. Reverté.
- Ceballos-Ruano, J.S., et al. (1998); *Tratamiento térmico superficial del acero U8 mediante láser de Nd:YAG*; Rev. Metal, Vol. 34(2), pp. 140-143.
- Chen, C.C., C.J. Tao, L.T. Shyu (1996); *Eutectoid temperature of carbon steel during laser surface hardening*; J. Mater. REs. Vol. 11, No. 2, pp.458-468.
- Dahotre, N.B. (1998); *Lasers in surface engineering*; ASM International.
- Duley, W.W. (1983); *Laser processing and analysis of materials*; Plenum.
- Frewin, M.R., D.A. Scott (1999); *Finite element model of pulsed laser welding*; Welding Research Supplement. January, pp. 15-22.
- Gaspar, P. et. al. (2000); *A study of the effect of wavelength on Q-switched Nd:YAG laser cleaning of eighteenth-century Portuguese tiles*; Studies in Conservation 45 pp. 189-200.
- Koai, K., R. Damaschek, H.W. Bergmann (1993); *Heat transfer in laser hardening of rotating cylinders*; HTD-Vol. 259, pp. 1-9.
- Labudovic, M., D. Hu, R.Kovacevic (1999); *Three-dimensional finite element modelling of laser surface modification*; Proc. Instn. Mech. Engrs. Vol. 214. Part. B, pp. 683-692.
- Nicolás, G. (1997); *Étude des mécanismes d'ablation et des modifications induites sur matériaux céramiques par rayonnement laser UV*; Tèse Doutoral, Université de Provence.
- Park, H.K. et al. (1994); *Practical excimer laser-assisted cleaning of solid surfaces*; ALT '94 International Conference. SPIE Vol. 249, pp. 22-3.1
- Ready, J.F. (1997); *Industrial applications of lasers 2nd Ed.*; Academic Press.
- Ready, J.F. (2001); *LIA handbook of laser materials processing*; Laser Institute of America. Magnolia Publishing, Inc.
- Rozzi, J.C., F.P. Incropera, Y.C. Shin (1998); *Transient thermal response of a rotating cylindrical silicon nitride workpiece subjected to a translating laser heat source*; Journal of Heat Transfer Vol. 120, pp. 907-915.

- Steen, W.M.(1998); *Laser material processing 2nd Ed.*; Springer.
- Tayal, M., K. Mukherjee (1994); *Thermal and microstructural analysis for laser surface hardening of steel*; J. Appl. Phys. Vol. 75(8), pp. 3855-3861.
- Thyagarajan, K., A.K. Ghatak (1981); *Lasers. Theory and applications*; Plenum Press.
- Vander Voort, G. F. (1991); *Atlas of time-temperature diagrams for irons and steels.*; Ed. ASM International.
- Wei, M.Y., C. Chen (1994); *Predicting case depth in tempered steels hardened via laser processing*; Mat. Sci. Tech., Vol. 10 pp. 69-73.
- Yilbas, B.S. (1997); *Laser heating process and experimental validation*; Int. J. Heat Mass Transfer, Vol.40, No. 5, pp. 1131-1143.
- Zubair, S.M., M.A. Chaudhry (1996); *Heat conduction in a semi-infinite solid due to time-dependent laser source*; Int. J. Heat Mass Transfer. Vol. 39 No. 14 pp. 3067-3074.

Capítulo 3

Estudio teórico del tratamiento térmico de materiales

3.1. Transmisión del calor

3.1.1. Conducción

3.1.2. Radiación

3.1.3. Convección

3.2. Modelos analíticos del campo de temperaturas

3.2.1. Flujo estacionario

3.2.2. Flujo dependiente del tiempo

3.3. Modelos numéricos: elementos finitos (FEM)

3.3.1. Descripción general

3.3.1.1. Discretización espacial

3.3.1.2. Criterio de convergencia

3.3.2. Particularización al análisis térmico

3.3.3. Transformaciones de fase

3.4. Transformaciones metalúrgicas en el sistema hierro-carbono

En este capítulo estudiaremos las tres posibles formas que tiene el calor de transmitirse (conducción, convección y radiación) para posteriormente construir la ecuación que equilibra los flujos térmicos. Empleando la función de Green resolveremos analíticamente la mencionada ecuación en cuatro situaciones bien distintas: flujo estacionario y flujo dependiente del tiempo con y sin movimiento relativo material-fuente. En todos los casos el intervalo de integración será infinito.

Como una alternativa de resolución, con el objeto de tratar con geometrías complejas, introduciremos el método de los elementos finitos y analizaremos alguna de sus características: discretizaciones espaciales y temporales, criterio de convergencia e incorporación de las transformaciones de fases.

Por último trataremos las transformaciones metalúrgicas de los aceros prestándole especial atención a la descripción de los diagramas de transformación isotérmicos.

3.1 Transmisión del calor

Tres son los métodos de transferencia calorífica: conducción, convección y radiación.

3.1.1 Conducción

Fourier estableció empíricamente la relación que gobierna la conducción calorífica: el flujo calorífico que atraviesa un elemento infinitesimal de área en un sentido es proporcional al gradiente de temperatura que hay en esa dirección. De forma matemática:

$$q_n'' = -\mathbf{k} \frac{\partial T}{\partial n} \quad [3.1]$$

siendo T la distribución de temperaturas, n el vector que marca la dirección en la que se toma el gradiente y \mathbf{k} la conductividad térmica. La presencia del signo negativo está justificada para asegurar que la transferencia calorífica fluya desde las regiones calientes hacia las frías. La conductividad térmica, lejos de ser una constante, varía con la temperatura, la presión y la composición química. Es común en la naturaleza encontrar materiales con anisotropías en su conductividad; para estas sustancias \mathbf{k} está representada por un tensor (*Rajadhyaksha, 2000*).

Si la sustancia es isotrópica, la expresión [3.28] se puede sustituir por:

$$q_n'' = -k \tilde{\mathbf{n}} T \quad [3.2]$$

El transporte de la energía en los sólidos se debe tanto al movimiento migratorio de los electrones libres, como a las ondas vibracionales de la red (*Incropera, 1999*) (*Touloukian, 1970*). Cada una de estas actividades aporta un sumando a la expresión de la conductividad, así:

$$\mathbf{k} = \mathbf{k}_e + \mathbf{k}_r \quad [3.3]$$

3. Estudio teórico del campo de temperaturas

Mientras que k_e , la componente electrónica, es inversamente proporcional a la resistencia eléctrica, k_r depende de la frecuencia de la interacción átomo-red. Así, por ejemplo, en los metales puros predomina la componente electrónica $k \approx k_e$; sin embargo, en los sólidos no-metálicos nos encontramos con la componente $k \approx k_r$. Una situación bien diferente tiene lugar en el caso de los sólidos no-metálicos cristalinos, satisfaciéndose que $k_r \gg k_e$.

3.1.2 Radiación

Todas las sustancias emiten energía en forma de radiación electromagnética como consecuencia de su temperatura. La ecuación que describe la energía radiada por unidad de volumen en el intervalo $[n, n + dn]$ para un cuerpo negro se conoce como ley de Planck:

$$E_{nb}(n, T) = \frac{8\pi h n^3}{c^3} \frac{1}{e^{hc/1kT} - 1} \quad [3.4]$$

donde $h = 6.6256 \times 10^{-34}$ J s es la constante de Planck, $c = 3 \times 10^{10}$ m s⁻¹, la velocidad de la luz en el vacío y T la temperatura absoluta. Se comprueba que esta expresión alcanza su valor máximo cuando se cumple que:

$$1 T = 2.8978 \times 10^{-3} \text{ m K} \quad [3.5]$$

lo que se conoce como ley de desplazamiento de Wien. Integrando la distribución de la energía [3.4] sobre todo el espectro se llega a la ley de Stefan-Boltzmann,

$$E_B(T) = s T^4 \quad [3.6]$$

siendo $s = 7.5643 \times 10^{-16}$ J m⁻³ K⁻⁴.

La definición de intensidad de radiación queda establecida como la fracción de la energía radiada que se propaga a través de un área infinitesimal dA en una dirección,

confinada en el interior de un pequeño ángulo sólido $d\Omega$, con una longitud de onda entre λ y $\lambda + \Delta\lambda$ en el intervalo de tiempo dt (Rohsenow, 1998).

$$I_{\lambda} = \lim_{(dA, d\Omega, d\lambda, dt) \rightarrow 0} \frac{dE_{\lambda}}{dA d\Omega d\lambda dt} \quad [3.7]$$

La relación existente entre la intensidad de una sustancia y la del cuerpo negro, para una misma longitud de onda, dirección (\mathbf{q}, \mathbf{f}) y temperatura, toma el nombre de emisividad (Rohsenow, 1998) (White, 1988).

$$e_{\lambda qf}(\lambda, \mathbf{q}, \mathbf{f}, T) = \frac{I_{\lambda}(\lambda, \mathbf{q}, \mathbf{f}, T)}{I_{\lambda B}(\lambda, T)} \quad [3.8]$$

Otras propiedades son:

- La absorptividad a define la fracción de la energía que es absorbida al incidir en una superficie.
- La reflectividad R es la parte de energía que refleja un plano.
- Por último, la transmisividad T es la porción de energía que se propaga hacia el interior de una sustancia.

Existen correspondencias entre estas propiedades. Así, para una misma longitud de onda y dirección,

$$a_{\lambda} + R_{\lambda} + T_{\lambda} = 1 \quad [3.9]$$

Para cuerpos opacos $T_{\lambda} = 0$, esta ecuación queda:

$$a_{\lambda} + R_{\lambda} = 1 \quad [3.10]$$

3. Estudio teórico del campo de temperaturas

Se puede demostrar que la emisividad espectral es igual a la absorptividad, para la misma longitud de onda y una dirección dada. Este enunciado se conoce como ley de Kirchhoff (Rohsenow, 1998) (White, 1988).

$$\mathbf{a}_1 = \mathbf{e}_1 \quad [3.11]$$

Por último, cabe decir que este conjunto de propiedades son muy sensibles a las alteraciones o contaminantes que tenga la superficie.

3.1.3 Convección

Al proceso de transferencia calorífica en el que un fluido intercambia energía por la acción combinada de la conducción, la radiación y su propio movimiento macroscópico se le denomina convección (Kakaç, 1995).

Cuando un fluido discurre cerca de un sólido, se observa experimentalmente que las partículas adyacentes a la superficie están pegadas. Esto se explica por la presencia de una fuerza viscosa que actúa retardando el movimiento del fluido. Pero según nos apartamos de la superficie, la velocidad relativa tiende asintóticamente hacia un cierto valor, el que tendría la velocidad del fluido sin perturbación. La corteza en la que se altera el libre movimiento del fluido recibe el nombre de capa límite.

Son dos los mecanismos físicos que contribuyen a la convección:

- En el interior de la capa límite, donde las velocidades se acercan a cero, domina el movimiento aleatorio de las partículas constitutivas del fluido.
- En la misma medida que el flujo avanza paralelo a la superficie hasta finalmente salir de la capa límite, crece la aportación del movimiento macroscópico (Incropera, 1999).

El proceso de transferencia convectiva del calor puede ser forzado con ayuda de medios externos que regulen el flujo de fluido. En las situaciones donde el flujo está inducido

por las diferencias de densidades a consecuencia de las distintas temperaturas, la convección será natural o libre.

La ecuación que gobierna estas evoluciones es la ley de enfriamiento de Newton:

$$q'' = \frac{q}{A} = h(T_{\text{superficie}} - T_{\text{fluido}}) \quad [3.12]$$

donde q tiene unidades de potencia, y h es una función compleja que depende de las condiciones del flujo, de las propiedades termofísicas del fluido (viscosidad, coeficiente de conducción, calor específico, densidad...) y de la geometría y dimensiones de la superficie (Kakaç, 1995). En algunas situaciones especiales h depende del incremento de temperatura, así por ejemplo, al producirse condensación, $h = h(\Delta T^2)$. La expresión de la ley de enfriamiento de Newton es aplicable, aunque restrictivamente (Rohsenow, 1998). Sustituyendo la ecuación [3.1] en [3.12] se obtiene la expresión

$$h = -\frac{\mathbf{k}(\partial T/\partial n)_s}{T_s - T_f} \quad [3.13]$$

Cuando el flujo alcanza velocidades altas próximas a las del sonido, incluso superiores, en la expresión de Newton se sustituye el término correspondiente a la temperatura del fluido por la temperatura adiabática de la pared (la temperatura que tendría la superficie en ausencia de transferencia de calor) (Rohsenow, 1998):

$$q'' = \frac{q}{A} = h(T_{\text{superficie}} - T_{\text{adiabática}}) \quad [3.14]$$

$$T_{\text{adiabática}} = T_{\text{fluido}} + r \frac{v^2}{2c}$$

siendo v la velocidad del fluido relativa a la superficie y c su capacidad calorífica. Es fácil ver que si v es pequeña la ecuación [3.14] se convierte en la [3.12]

Bibliografía

- Carslaw, H.S., J.C. Jaeger (1992); *Conduction of heat in solids*, 2nd Ed.; Oxford.
- Holman, J.P.(1997); *Heat Transfer*, 8th Ed.; McGraw-Hill.
- Incropera, F.P., D.P. De Weitt (1999); *Fundamentos de transferencia de calor*, 4a. Ed.; John Wiley & Sons.
- Kakaç, S., Y. Yener (1995); *Convective heat transfer*, 2nd Ed.; CRC.
- Rajadhyaksha, S.M., P. Michaleris (2000); *Optimization of thermal process using an Eulerian formulation and application in laser surface hardening*; Int. J. Numer. Meth. Engng. 47:1807-1823.
- Rohsenow, W.M., J.P. Hartnolt, Y.J. Cho (1998); *Handbook of heat transfer*, 3rd Ed.; McGraw-Hill.
- Touloukian, V.S. et al. (1970); *Thermophysical properties of matter, Vol. 1. Thermal conductivity*; Purdue University.
- White, F.M. (1988); *Heat and mass transfer*; Addison-Wesley.

3.2 Modelos analíticos del campo de temperaturas

El objeto de este apartado es el de describir un conjunto de métodos analíticos que nos permitan obtener el campo de temperatura $T(\mathbf{r}, t)$ para la ecuación de transferencia calorífica. Nuestro propósito es doble:

- por un lado tener un método de cálculo que rápidamente permita hacer una estimación óptima de los parámetros del proceso de tratamiento superficial con láser,
- y por el otro, conseguir una primera aproximación del campo de temperaturas $T(\mathbf{r}, t)$ con el fin de calibrar el método de los elementos finitos.

Comencemos enunciando el Primer Principio de la Termodinámica:

$$\Delta U = \sum_i Q_i - \sum_i W_i \quad [3.15]$$

En todas las aplicaciones que vamos a estudiar despreciaremos el término del trabajo aproximando la variación de energía interna como:

$$\Delta U \approx \sum_i Q_i \quad [3.16]$$

El sumatorio del calor incluirá las contribuciones debidas a la conducción, convección, radiación y las fuentes. Entonces el balance de las energías queda

$$\int \int_{t \text{ Vol}} \mathbf{r} c \frac{dT}{dt} dVol dt = \int \int_{t S} k \tilde{N} T dS dt + \int \int_{t S} h \Delta T dS dt + \int \int_{t S} \mathbf{s} e (T^4 - T_0^4) dS dt + \int \int_{t \text{ Vol}} f(\mathbf{r}, t) dVol dt \quad [3.17]$$

3. Estudio teórico del tratamiento térmico de materiales

donde \mathbf{r} representa la densidad, c la capacidad calorífica y k la conductividad térmica. Desarrollando la derivada convectiva y aplicando el teorema de la divergencia al término conductivo

$$\int \int_{t \text{ Vol}} \left[\mathbf{r}c \frac{\partial T}{\partial t} + \mathbf{r}c\mathbf{v}\tilde{N}T - \tilde{N}(\mathbf{k}\tilde{N}T) \right] dVol dt = \int \int_{t S} h\Delta T dS dt + \int \int_{t S} \mathbf{se}(T^4 - T_0^4) dS dt + \int \int_{t \text{ Vol}} f(\mathbf{r},t) dVol dt \quad [3.18]$$

\mathbf{v} , que aparece con la derivada convectiva, representa la velocidad de un elemento de volumen diferencial del entorno geométrico de integración (Fig. 3.1). Si menospreciamos las contribuciones tanto de la convección como de la radiación térmica, la ecuación de la conducción calorífica nos queda

$$\mathbf{r}(\mathbf{r},T)c(\mathbf{r},T)\frac{\partial T(\mathbf{r},t)}{\partial t} + \mathbf{r}(\mathbf{r},T)c(\mathbf{r},T)\mathbf{v}\tilde{N}T(\mathbf{r},t) + \tilde{N}(-\mathbf{k}(\mathbf{r},T)\tilde{N}T(\mathbf{r},t)) = f(\mathbf{r},t) \quad [3.19]$$

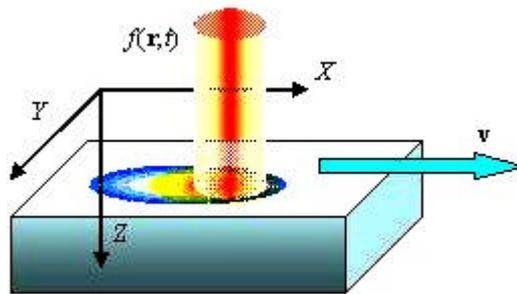


Fig. 3.1 La fuente térmica $f(\mathbf{r},t)$ incide en la pieza material, que se mueve con velocidad \mathbf{v} relativa a la fuente.

3.2.1 Flujo estacionario

El flujo estacionario se alcanza cuando la distribución de temperaturas deja de depender del tiempo (Kou, 1983) (Rajadhyaksha, 2000),

$$\frac{\partial T}{\partial t} = 0 \quad [3.20]$$

La aplicación de esta condición en la ecuación [3.19] no permite plantear dos posibilidades, que el flujo sea estacionario con la presencia de una fuente en movimiento respecto del material, o que sea estacionario sin ésta.

Flujo estacionario sin movimiento de material

En esta situación la ley de la conservación de la energía (ec. [3.19]), en tres dimensiones, queda reducida a dos términos,

$$\tilde{\mathbf{N}}(-\mathbf{k}\tilde{\mathbf{N}}T) = f(\mathbf{r}) \quad [3.21]$$

donde $f(\mathbf{r})$ representa la distribución espacial de las fuentes, con unidades de energía dividida por el tiempo y el volumen. Si suponemos que la conductividad térmica \mathbf{k} es constante e independiente de las coordenadas geométricas, [3.21] se transforma en,

$$-\nabla^2 T = \frac{f(\mathbf{r})}{\mathbf{k}} \quad [3.22]$$

expresión que se conoce como ecuación de Poisson. Buscamos resolver esta ecuación en su forma general, es decir, en ausencia de condiciones de contorno. El uso de las funciones de Green nos permite resolver la ecuación de Poisson a partir de la solución de la homogénea, la ecuación de Laplace:

$$\nabla^2 T = 0 \quad [3.23]$$

Sea $G(\mathbf{r}, \mathbf{r}')$ la función de Green que resuelve [3.23]. Dicha función se define por medio del enunciado

$$-\nabla^2 G(\mathbf{r}, \mathbf{r}') = \mathbf{d}(\mathbf{r} - \mathbf{r}') \quad [3.24]$$

3. Estudio teórico del tratamiento térmico de materiales

siendo $\mathbf{r} = (x, y, z)$ las coordenadas de un punto y $\mathbf{r}' = (x', y', z')$, el vector de posición de una fuente puntual. G representa la función de Green que resuelve el operador diferencial, y describe la distribución de temperaturas en el punto \mathbf{r} , debida a una fuente puntual de intensidad unitaria, situada en la posición \mathbf{r}' , que actúa en un medio infinito con una temperatura inicial de cero grados (Carslaw, 1992) (Weisstein, 1999). Esta función es invariante bajo traslaciones espaciales, entonces manifestará una dependencia con la distancia de separación $|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|$. La expresión de G es bien conocida (Carslaw, 1992),

$$G(\mathbf{r}, \mathbf{r}') = \frac{1}{4\pi \sqrt{(x-x')^2 + (y-y')^2 + (z-z')^2}} \quad [3.25]$$

Entonces la solución de la ecuación de Poisson viene dada por:

$$T(\mathbf{r}) = T_0 + \frac{1}{k} \int f(\mathbf{r}') G(\mathbf{r}, \mathbf{r}') d^3\mathbf{r}' \quad [3.26]$$

donde \mathbf{r}' representa el vector de posición de la fuente $f(\mathbf{r}')$ y T_0 la temperatura inicial del material.

Flujo estacionario con movimiento de material

La expresión de la conservación de la energía, ecuación [3.19], para una situación de flujo estacionario cuando se tiene material en movimiento, es:

$$\mathbf{r} \cdot \mathbf{c} \nabla T + \tilde{\mathbf{N}}(-\mathbf{k} \nabla T) = f(\mathbf{r}) \quad [3.27]$$

Si suponemos que las propiedades del material son constantes e independientes de la temperatura la relación anterior se transforma en,

$$\frac{\mathbf{v}}{\mathbf{a}} \tilde{\mathbf{N}} T - \nabla^2 T = \frac{f(\mathbf{r})}{k} \quad [3.28]$$

Al coeficiente $\mathbf{a} = \mathbf{k} / \mathbf{r}_c$ se le denomina difusividad térmica.

Representemos con G a una función de Green que resuelve el caso en el que la fuente sea puntual, es decir, $G(\mathbf{r}, \mathbf{r}')$ es solución de la ecuación

$$\mathbf{v}\tilde{\nabla}G(\mathbf{r}, \mathbf{r}') - \mathbf{a}\nabla^2G(\mathbf{r}, \mathbf{r}') = \mathbf{d}(\mathbf{r} - \mathbf{r}') \quad [3.29]$$

La expresión de la función de Green es conocida, véase, por ejemplo, (Dowden, 2001)

$$G(\mathbf{r}, \mathbf{r}') = \frac{1}{4\pi\mathbf{a}|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|} \exp\left\{\frac{|\mathbf{v}|}{2\mathbf{a}}\left[(\mathbf{r} - \mathbf{r}') \cdot \hat{\mathbf{V}} - |\mathbf{r} - \mathbf{r}'|\right]\right\} \quad [3.30]$$

donde $\hat{\mathbf{V}}$ es un vector unitario en la dirección del movimiento de la fuente puntual. Si la velocidad es cero se llega a la expresión [3.25].

La ecuación [3.30] puede generalizarse para fuentes extensas integrado la función $f(\mathbf{r})$ sobre toda la superficie. Podemos calcular el campo de temperaturas aplicando:

$$T(\mathbf{r}) = T_0 + \frac{\mathbf{a}}{\mathbf{k}} \int f(\mathbf{r}')G(\mathbf{r}, \mathbf{r}')d^3\mathbf{r}' \quad [3.31]$$

3.2.2 Flujo dependiente del tiempo

Dos son las posibilidades que estudiaremos en este apartado, por un lado buscaremos el campo de temperaturas para una fuente en reposo relativo al material, y por el otro investigaremos la distribución de temperatura cuando hay movimiento relativo entre la fuente y la sustancia calentada.

Material sin movimiento

Calcularemos la solución a la ecuación del calor para la conducción [3.19], en el caso de que hubiera un flujo no-estacionario sin la presencia de la convección forzada.

$$\mathbf{r}c \frac{\partial T}{\partial t} + \tilde{N}(-\mathbf{k}\tilde{N}T) = f(\mathbf{r}, t) \quad [3.32]$$

La función $f(\mathbf{r}, t)$ representa las fuentes que actúan sobre el volumen. Si las propiedades son constantes e independientes de la temperatura, la ecuación se transformará en,

$$\frac{1}{\mathbf{a}} \frac{\partial T}{\partial t} - \nabla^2 T = \frac{f(\mathbf{r}, t)}{\mathbf{k}} \quad [3.33]$$

Sea $G(\mathbf{r}, \mathbf{r}', t, t')$ una función que cumpla:

$$\frac{\partial G(\mathbf{r}, \mathbf{r}', t, t')}{\partial t} - \mathbf{a}\nabla^2 G(\mathbf{r}, \mathbf{r}', t, t') = \mathbf{d}(\mathbf{r}, \mathbf{r}', t, t') \quad [3.34]$$

$G(\mathbf{r}, \mathbf{r}', t, t')$ representa la contribución de una fuente puntual situada en la posición \mathbf{r}' en el instante t' sobre un punto de vector de posición \mathbf{r} durante el tiempo t . Podemos descomponer G en tres factores (*Geissler*):

$$G(\mathbf{r}, \mathbf{r}', t, t') = G_x(x, x', t, t') G_y(y, y', t, t') G_z(z, z', t, t') \quad [3.35]$$

El contenido de cada uno de estos términos se deduce de la resolución de la ecuación [3.34] particularizada para una dimensión espacial. Así cada término tiene la forma

$$\begin{aligned} G_x(x, x', t, t') &= \frac{1}{\sqrt{4\mathbf{p}\mathbf{a}(t-t')}} \exp\left\{-\frac{(x-x')^2}{4\mathbf{a}(t-t')}\right\} \\ G_y(y, y', t, t') &= \frac{1}{\sqrt{4\mathbf{p}\mathbf{a}(t-t')}} \exp\left\{-\frac{(y-y')^2}{4\mathbf{a}(t-t')}\right\} \\ G_z(z, z', t, t') &= \frac{1}{\sqrt{4\mathbf{p}\mathbf{a}(t-t')}} \exp\left\{-\frac{(z-z')^2}{4\mathbf{a}(t-t')}\right\} \end{aligned} \quad [3.36]$$

y el propagador global queda como sigue:

$$G(\mathbf{r}, \mathbf{r}', t, t') = (4\mathbf{pa}(t-t'))^{\frac{3}{2}} \exp\left\{-\frac{|\mathbf{r}-\mathbf{r}'|^2}{4\mathbf{a}(t-t')}\right\} \quad [3.37]$$

Estas expresiones son válidas únicamente para $t > t'$. En caso contrario la función de Green toma valor cero.

Por último, la solución a la ecuación [3.33] en su expresión más general se obtiene de la siguiente integral:

$$T(\mathbf{r}, t) = \begin{cases} T_0 + \frac{\mathbf{a}}{\mathbf{k}} \int f(\mathbf{r}', t) G(\mathbf{r}, \mathbf{r}', t, t') d^3\mathbf{r}' dt' & t > 0 \\ T_0 & t \leq 0 \end{cases} \quad [3.38]$$

Es fácil comprobar que si la fuente es constante para un tiempo infinito se obtiene la solución estacionaria [3.25]. Podemos llegar a un resultado particularmente útil bajo un conjunto de hipótesis:

- El medio es plano y semiinfinito ($z > 0$).
- Únicamente hay flujo calorífico en el plano $z = 0$, aunque éste puede depender del tiempo y la posición $(x, y, 0)$.
- La temperatura inicial es uniforme (por simplicidad la consideraremos nula).

Así la distribución de temperaturas es:

$$T(\mathbf{r}, t) = \begin{cases} \frac{2\mathbf{a}}{\mathbf{k}} \int_0^{+\infty} \int_{-\infty}^{+\infty} \int_{-\infty}^{+\infty} f(x', y', t') e^{-\frac{(x-x')^2 + (y-y')^2 + z^2}{4\mathbf{a}(t-t')}} [4\mathbf{pa}(t-t')]^{\frac{3}{2}} dx' dy' dt' & t > 0 \\ 0 & t \leq 0 \end{cases} \quad [3.39]$$

Material en movimiento

La ecuación que queremos resolver es:

$$\mathbf{rc} \frac{\partial T}{\partial t} + \mathbf{rcv}\tilde{\mathbf{N}}T + \tilde{\mathbf{N}}(-\mathbf{k}\tilde{\mathbf{N}}T) = f(\mathbf{r}, t) \quad [3.40]$$

En el supuesto de que las propiedades del material sean constantes e independientes de la temperatura, la ecuación queda

$$\frac{1}{\mathbf{a}} \frac{\partial T}{\partial t} + \frac{\mathbf{v}}{\mathbf{a}} \tilde{\mathbf{N}}T - \tilde{\mathbf{N}}^2 T = \frac{f(\mathbf{r}, t)}{\mathbf{a}} \quad [3.41]$$

Sea G una función solución de la ecuación:

$$\frac{\partial G(\mathbf{r}, \mathbf{r}', t, t')}{\partial t} + \mathbf{v}\tilde{\mathbf{N}}G(\mathbf{r}, \mathbf{r}', t, t') - \mathbf{a}\nabla^2 G(\mathbf{r}, \mathbf{r}', t, t') = \mathbf{d}(\mathbf{r}, \mathbf{r}', t, t') \quad [3.42]$$

G es una función de Green y representa la solución de la ecuación [3.42] para una fuente puntual. Su forma es (Dowden, 2001):

$$G(\mathbf{r}, \mathbf{r}', t, t') = \frac{1}{8\mathbf{pa}\sqrt{\mathbf{ap}}(t-t')^3} \exp \left\{ \frac{\mathbf{v} \cdot (\mathbf{r} - \mathbf{r}')}{2\mathbf{a}} - \frac{|\mathbf{v}|^2 (t-t')}{4\mathbf{a}} - \frac{|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|^2}{4\mathbf{a}(t-t')} \right\} \quad [3.43]$$

La solución para una fuente extensa se puede deducir a partir de esta expresión. El campo de temperaturas bajo las mismas hipótesis que la ecuación [3.39] queda:

$$T(\mathbf{r}, t) = \begin{cases} \frac{2\mathbf{a}}{\mathbf{k}} \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \int_{t'=0}^t \frac{f(\mathbf{r}', t')}{8\mathbf{pa}\sqrt{\mathbf{ap}}(t-t')^3} e^{\frac{\mathbf{v} \cdot (\mathbf{r} - \mathbf{r}')}{2\mathbf{a}} - \frac{|\mathbf{v}|^2 (t-t')}{4\mathbf{a}} - \frac{|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|^2}{4\mathbf{a}(t-t')}} dt' dx' dy' & t > 0 \\ 0 & t \leq 0 \end{cases} \quad [3.44]$$

Bibliografía

- Álvarez, C. et al. (2001); *Real time control and monitoring of laser hardening process: applications to cylindrical workpieces*; Laser Assisted net Shape Engineering 3. Proceeding of the LANE 2001. Surface & Heat Treatment. 223-234.
- von Allmen, M., A. Blatter (1995); *Laser-beam interactions with materials 2nd Ed.*; Springer.
- Bailer-Jones, C.A.L., H.K.D.H. Bhadeshia, D.J.C. MacKay (1999); *Gaussian process modeling of austenite formation in steel*; Materials Science Technology, Vol. 15, pp. 287-294.
- Carslaw, H.S., J.C. Jaeger (1992); *Conduction of heat in solids 2nd Ed.*; Oxford Science Publications.
- Dowden, J.M. (2001); *The mathematics of thermal modelling*; Chapman & Hall/CRC
- Duley, W.W. (1983); *Laser processing and analysis of materials*; Plenum.
- Festa, R., O. Manca, V. Naso (1990); *Simplified thermal models in laser and electron beam surface hardening*; J. Heat Mass Transfer, Vol. 33. No. 11, pp. 2511-2518.
- Galantucci, L.M., L. Tricarico (1990); *Un Modello statistico per la previsione dei profili di durezza in acciai da bonifica e da tempra superficiale sottoposti a saldatura ed a trattamento termico*; La Metallurgia Italiana, Vol. 82, No. 10, pp. 969-979.
- Gu, B.W., et al. (1994); *Three dimensional numerical model for laser transformation hardening of metals*; Mat. Sci. Tech., Vol 10, pp. 425-430.
- Kou, S., D.K. Sun, Y.P. Le (1983); *A Fundamentals study of laser transformation hardening*; Metallurgical Transactions A, Vol. 14^a, pp. 643-653.
- Marya, M, S.K. Marya (1997); *Prediction & optimization of laser transformation hardening*; Laser Assisted Net Shape Engineering Proceedings of the LANE'97; Eds. M. Geiger, F. Vollertsen, Meisenbach Bamberg 1997.
- Ohmura, E., K. Inoue (1991); *Theoretical analysis of laser transformation hardening process of hypoeutectoid steel based on kinetics*; JSME International Journal, Vol. 34, No. 4, pp. 421-429.
- Rajadhyaksha, S.M., P. Michaleris (2000); *Optimization of thermal process using an Eulerian formulation and application in laser surface hardening*; Int. J. Numer. Meth. Engng. 47:1807-1823.
- Weinberg, H.F. (1992); *Ecuaciones diferenciales en derivadas parciales*; Reverté

3. Estudio teórico del tratamiento térmico de materiales

Weisstein, E.W. (1999); *CRC concise encyclopaedia of mathematics*; Chapman & Hall / CRC.

Zimba, J., et al. (1999); *Three-dimensional diffusion model for austenitisation of ferritic spheroidal graphite irons*; *Materials Science and Technology*, Vol 15, pp. 1024-1030.

Zubair, S.M., M.A. Chaudhry (1996); *Heat Conduction in a Semi-Infinite Solid Due to Time-Dependent Laser Source*; *Int. J. Heat Mass Transfer*. Vol. 39 No. 14 pp. 3067-3074.

3.3 Modelos numéricos: elementos finitos (FEM)

En contra de las primeras opiniones que situaban a las técnicas numéricas como herramientas exclusivamente predictivas, asociadas en el caso de la Ingeniería Industrial a métodos de producción asistidos por ordenador -CAD, CAE e CAM- (Bathe, 1996), el método de los elementos finitos destaca por su capacidad de análisis en situaciones complejas, incluso en el ámbito de la investigación. Son un ejemplo los artículos: (Álvarez, 2001) (Brown, 1992) (Chen, 2000) (Dai, 2001) (Deus) (Frewin, 1999) (Galantucci, 1997) (Koai, 1993) (Labudovic, 2000) (Ocaña, 1998) (Saavedra, 2000) (Wang, 1992) y (Yáñez, 2001)

3.3.1 Descripción general

El método de los elementos finitos tiene su origen en los años cincuenta, cuando ingenieros adaptan el análisis variacional aplicado a los medios continuos a las estructuras discretizadas con elementos. Sin embargo, pronto se dieron cuenta de la potencialidad de este método en aplicaciones muy variadas: análisis térmico, estudio de dinámica de fluidos, campos electromagnéticos... (Bathe, 1996) (Thoméé, 1997).

En la bibliografía consultada no existe una única descripción matemática del método de los elementos finitos, ni en cuanto a su origen, ni en su formulación. Algunos autores sostienen que el modelo evoluciona de los principios variacionales, entendiendo al algoritmo de los residuos ponderados como uno más (Lewis, 1996) (Prenter, 1989), mientras que otros defienden que su génesis está en la fórmula de Garlekin (Comini, 1994) (Zienkewicz, 1983) (Thoméé, 1997). La mayoría de ellos no distinguen entre el método de los elementos finitos y el de Garlekin (Comini, 1994) (Lewis, 1996) (Thoméé, 1997) (Zienkewicz, 1983). Dos opiniones excepcionales son las de P. M. Prenter, que equipara el algoritmo de Rayleigh-Ritz al método de los elementos finitos (Prenter, 1989), y la de K-J. Bathe, que usa el principio de los trabajos virtuales ¹ para describir el modelo (Bathe, 1996). Por último H. Huang y A. Usmani describen un método de los elementos finitos componiendo una compilación de tres procesos: la

¹ Este autor, al abordar el estudio de la convergencia del método, mantiene que "... the application of the principle of virtual work is identical to using the stationarity condition of the total potential of the system" (pg. 234). La ambigüedad reside, no tanto en lo que dice sino en dónde lo dice.

3. Estudio teórico del tratamiento térmico de materiales

formula variacional de Rayleigh-Ritz, el recubrimiento del entorno de integración con intervalos compactos e interconectados por los nodos y la aplicación del algoritmo de residuos ponderados (*Huang, 1994*).

Métodos variacionales y métodos de residuos

Los métodos variacionales son el modo de expresar las leyes físicas, además de una forma de investigar sus soluciones en espacios finitos Ω (*Dautray, 1988*).

Tomando como punto de partida la ecuación:

$$\mathcal{L}f = p \quad [3.45]$$

donde \mathcal{L} representa un operador que al actuar sobre a función f da como resultado p , su formulación variacional tiene la estructura:

$$\Pi(f, I) = \int_{\Omega} I(\mathcal{L}f - p) d\Omega \quad [3.46]$$

donde I representa una función multiplicadora. Un método variacional consiste en un algoritmo numérico que permite encontrar una función de aproximación f_N , debiendo cumplir que (*Prenter, 1989*)

$$\|\mathcal{L}f_N - p\| + \|f_N - f\| \rightarrow 0 \quad [3.47]$$

Si $\Pi(f, I)$ es simétrico y definido positivo, el extremo $d\Pi$ representará a un mínimo.

La formulación de los residuos ponderados se construye a partir de la apropiada selección del multiplicador I en la ecuación (*Bathe, 1996*) (*Zienkiewicz, 1983*):

$$\int_{\Omega} I(\mathcal{L}f_N - p) d\Omega = 0 \quad \forall I \quad [3.48]$$

Por último hay que señalar que la ventaja que presentan cualquiera de las dos formulaciones consiste en la reducción de la dimensión de las derivadas que describen el problema inicial (Bathe, 1996).

Método de los elementos finitos

A veces no existe una formulación variacional para un determinado problema físico, como en el caso de la ecuación de la conducción calorífica. Una alternativa consiste en el uso de una composición de tres métodos (Huang, 1994) (Zienkiewicz, 1983):

- Aproximación de Rayleigh-Ritz.
- Discretización del espacio en elementos.
- Método de residuos de Galerkin.

Retomemos, una vez más, la ecuación [3.45]. La aproximación de Rayleigh-Ritz consiste en sustituir la función \mathbf{f} por otra \mathbf{f}_N solución de la expresión variacional [3.48]:

$$\mathbf{f}_N = \sum_{i=1}^e a_i N_i \quad [3.49]$$

de tal manera que aparecerá un residuo

$$R = \mathcal{L} \mathbf{f}_N - p \quad [3.50]$$

Dividamos ahora el dominio Ω en e intervalos (bolas en \mathbb{R}^n), de manera que quede totalmente recubierto sin que se haya solapamientos. Además, agruparemos los polinomios $a_i N_i$ por conjuntos, de manera que describirán el comportamiento de las funciones \mathbf{f}_N localmente en cada intervalo. Las estructuras matemáticas así construidas reciben el nombre de elementos.

De este modo se aplica el método de residuos no sobre el dominio Ω , sino sobre cada uno de los dominios Ω_i que lo recubren:

$$\sum_{i=1}^e \int_{\Omega_i} I(Lf_N - p) d\Omega_i = 0 \quad [3.51]$$

El algoritmo de Garlekin consiste en tomar los multiplicadores iguales a los polinomios de aproximación:

$$I = N_i \quad [3.52]$$

Esto conduce a una formulación matricial de la ecuación [3.45]:

$$[\mathbf{K}]_{e \times e} [\mathbf{A}]_e = [\mathbf{P}]_e \quad [3.53]$$

Donde $[\mathbf{K}]_{e \times e}$ representa una matriz cuadrada de rango e^2 que recibe el nombre de matriz de estructura, $[\mathbf{A}]_e$ representa el vector de los coeficientes de la aproximación [3.49] y $[\mathbf{P}]_e$ es un vector de dimensión e . Sus coeficientes tienen la forma:

$$\begin{aligned} p_i &= \int_{\Omega_i} N_i p d\Omega_i \\ k_{ij} &= \int_{\Omega_i} N_i \{L(a_j N_j)\} d\Omega_i \end{aligned} \quad [3.54]$$

3.3.1.1 Discretización espacial

Por discretización espacial se entiende la reticulación del espacio de integración Ω en elementos. La dimensión de la malla contribuye a la exactitud con la que se obtiene la solución, es decir, cuanto más pequeño sea el tamaño de los elementos, mayor será la precisión del resultado numérico. El precio que hay que pagar al aumentar el número de elementos, y consecuentemente el de nodos, es un mayor consumo de memoria y de tiempo de procesamiento (*Huang, 1994*) (*Lewis, 1996*) (*Saavedra, 2000*).

Vamos a estudiar las tres posibilidades en la configuración de la red en \mathbb{R}^3 empleadas en las publicaciones de investigación, con la condición de que haya compatibilidad entre elementos, es decir, que la unión entre dos retículos se haga por medio de los nodos de la periferia (*Fig. 3.2*):

- Mallado homogéneo e isótropo. En esta situación en la que Ω queda recubierto por cubos de lado h , el error de la aproximación tiene la forma (*Bathe, 1996*):

$$\|\mathbf{f}_N - \mathbf{f}\| \leq Ch^k \quad [3.55]$$

donde \mathbf{f} y \mathbf{f}_N representan, respectivamente, la solución exacta y aproximada de [3.45]. El parámetro C es una constante que depende de las propiedades del material y k proporciona el orden de convergencia.

- Mallado homogéneo no-isótropo. Lo que se pretende es completar el espacio de integración con paralelepípedos que tengan únicamente dos dimensiones iguales, consiguiendo así una mayor densidad de la red en una de las direcciones. En esta situación el error es (*Johnson, 1978*):

$$\|\mathbf{f}_N - \mathbf{f}\| \propto \left(\frac{h}{\mathbf{r}}\right)^k \quad [3.56]$$

Aquí h es la dimensión mayor de una retícula y \mathbf{r} representa el diámetro de la mayor esfera inscrita en el elemento. Al cociente entre estas longitudes se denomina relación de aspecto.

- Mallado adaptativo. Este modelo de reticulación optimiza los parámetros de la red en función de un análisis local del error, calculado a partir del gradiente del resultado. La red evoluciona con sucesivas simulaciones, refinando la malla en cada proceso a partir de la distribución de los errores en la solución anterior. La red resultante es muy irregular (por su flexibilidad en la adaptación a las formas geométricas, ya que emplea prismas con base triangular de distintos tamaños), y

más densa allí donde el error es mayor (Huang, 1994) (Lewis, 1996) (Zienkiewicz, 1983).

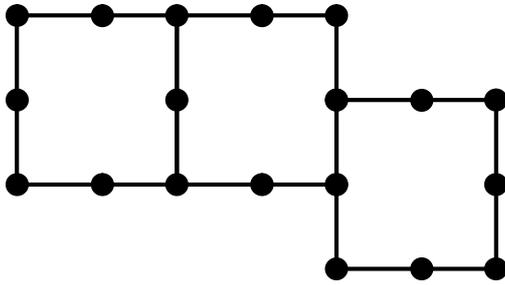


Fig. 3.2 (a) La conexión compatible entre elementos se hace mediante los nodos.

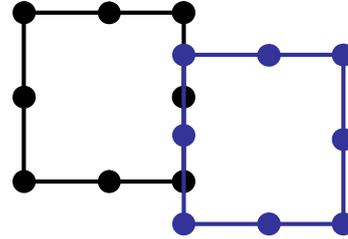


Fig. 3.2 (b) Ejemplo de conexión incompatible entre elementos

3.3.1.2 Criterio de convergencia

Una vez que tenemos un modelo matemático de un problema físico, que deseamos o necesitamos resolver numéricamente, necesitamos de un criterio que indique cuando un resultado se puede considerar una solución. La convergencia del método de los elementos finitos queda definida por la ecuación [3.45]. Ahora bien, puesto que la solución exacta es desconocida, se necesita de un procedimiento que permita obviar esta ignorancia.

Tomemos las variables conjugadas $Q_i(t)$, energía térmica del nodo i -ésimo en el tiempo t , y $f_i(t)$, distribución de temperatura de ese punto para el mismo instante. Sobre un sistema de coordenadas plano representaremos los pares (f_{i-1}, Q_{i-1}) y (f_i, Q_i) (Fig. 3.3). Queremos discernir si el resultado numérico $f_{i+1}^n(t)$ podemos considerarlo como una solución para el nodo $i+1$ -ésimo (Abaqus, 1997).

El procedimiento es como sigue:

- A partir de los puntos predecesores (f_{i-1}, Q_{i-1}) y (f_i, Q_i) se calcula una recta sobre la que estará la posible solución teórica.

- Por proyección se estimarán los puntos de corte entre esta recta y las coordenadas del valor numérico del resultado f_{i+1}^n y Q_{i+1}^n .
- Por último, se comparan los valores teóricos y los numéricos. Si las diferencias Δf_{i+1} y ΔQ_{i+1} son más pequeñas que una cierta tolerancia, valor que impone el programador, entonces se considerará que el algoritmo ha alcanzado la solución para el elemento $i+1$ -ésimo.
- Este proceso se repite para cada uno de los nodos de la discretización.

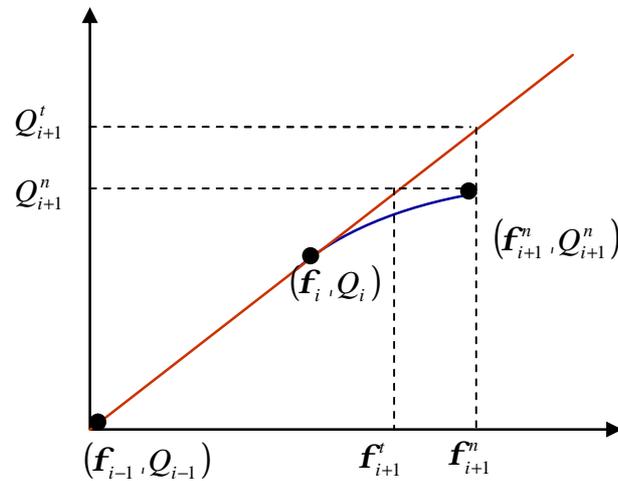


Fig. 3.3 Sobre un plano de coordenadas f , Q se representan las soluciones teóricas (en rojo) y numéricas (en azul) para el nodo $i+1$.

3.3.2 Particularización al análisis térmico

Una vez sentadas las bases aplicaremos el método de los elementos finitos a la ecuación del calor en las siguientes condiciones:

- No habrá pérdidas energéticas ni por convección ni por radiación.
- Se conservará la masa.

3. Estudio teórico del tratamiento térmico de materiales

- No existirá movimiento del medio material.
- El flujo calorífico dependerá del tiempo.
- Las propiedades del material son función de la temperatura.

$$\mathbf{rc} \frac{\partial T}{\partial t} + \tilde{N}(-\mathbf{k}\tilde{N}T) = f(\mathbf{r}, t) \quad \text{en } V \quad [3.57]$$

Además tendremos en cuenta la presencia de una condición de contorno tipo Newman:

$$-\mathbf{k}\tilde{N}T \cdot \hat{\mathbf{s}} = q \quad \text{en } S \quad [3.58]$$

El vector unitario $\hat{\mathbf{s}}$ es normal a la superficie S , y con sentido positivo cuando apunta hacia afuera. Este conjunto de dos ecuaciones enuncia la formulación fuerte del problema.

Apliquemos entonces, el método enumerado en el apartado **3.3.1**.

Primer paso: aproximación de Rayleigh-Ritz

Escogeremos una solución aproximada en forma de distribución de temperatura:

$$T_N(x, y, z, t) = \sum_{i=1}^m N_i(x, y, z) \mathbf{q}_i(t) \quad [3.59]$$

Buscaremos minimizar los residuos:

$$\begin{aligned} R_v &= \int_V \left[\mathbf{rc} \frac{\partial T_N}{\partial t} - \tilde{N}(\mathbf{k}\tilde{N}T_N) - f(\mathbf{r}, t) \right] dV \\ R_s &= \int_S (\mathbf{k}\tilde{N}T_N \cdot \hat{\mathbf{s}} + q) dS \end{aligned} \quad [3.60]$$

Segundo paso: discretización del espacio en elementos

Construiremos la reticulación de la geometría, asociando los polinomios de aproximación en conjuntos, nominalmente elementos, en un número $e \leq m$. A la suma de todos los polinomios $N_i(x, y, z)$ pertenecientes a un mismo elemento, se le denomina función de estructura, y a las variables $\mathbf{q}_i(t)$ temperaturas nodales.

Tercer paso: método de residuos de Garlekin

Aplicando el método de los residuos ponderados para minimizar [3.60]:

$$\int_V W \left[\mathbf{r}c \frac{\partial T_N}{\partial t} - \tilde{\mathbf{N}}(\mathbf{k}\tilde{\mathbf{N}}T_N) - f(\mathbf{r}, t) \right] dV + \int_S W(\mathbf{k}\tilde{\mathbf{N}}T_N \cdot \hat{\mathbf{s}} + q) dS = 0 \quad \forall W \quad [3.61]$$

el método de Garlekin escoge como multiplicador a la función de estructura:

$$W = N_j \quad [3.62]$$

de modo que al introducir la expresión anterior,

$$\int_V N_j \left[\mathbf{r}c \frac{\partial T_N}{\partial t} - \tilde{\mathbf{N}}(\mathbf{k}\tilde{\mathbf{N}}T_N) - f(\mathbf{r}, t) \right] dV + \int_S N_j(\mathbf{k}\tilde{\mathbf{N}}T_N \cdot \hat{\mathbf{s}} + q) dS = 0 \quad [3.63]$$

Esta ecuación se conoce como formulación débil del problema de la conducción calorífica. La aplicación de la identidad de Green

$$-N_j \nabla(\mathbf{k}\nabla T_N) = (\nabla N_j) \cdot \mathbf{k}\nabla T_N - \nabla(N_j \mathbf{k}\nabla T_N) \quad [3.64]$$

nos permite llegar a:

$$\int_V N_j \mathbf{r}c \frac{\partial T_N}{\partial t} dV + \int_V \tilde{\mathbf{N}}N_j \mathbf{k}\tilde{\mathbf{N}}T_N dV - \int_V N_j f(\mathbf{r}, t) dV + \int_S N_j q dS = 0 \quad [3.65]$$

3. Estudio teórico del tratamiento térmico de materiales

La ventaja que aporta el método de Garlekin consiste en que partiendo de una expresión con derivadas segundas, conseguimos simplificarla hasta que esta dependencia se reduce a las derivadas primeras. El siguiente paso a dar consiste en sustituir T_N por su expresión. Obtenemos entonces:

$$\sum_{i=1}^m \left\{ \int_V \left[N_j \mathbf{r} c N_i \frac{\partial \mathbf{q}_i}{\partial t} + \tilde{\mathbf{N}} N_j \mathbf{k} \tilde{\mathbf{N}} N_i \mathbf{q}_i - N_j f(\mathbf{r}, t) \right] dV + \int_S N_j q dS \right\} = 0 \quad [3.66]$$

Esta ecuación tiene la estructura matricial:

$$\mathbf{A}\dot{\mathbf{Q}} + \mathbf{B}\mathbf{Q} - \mathbf{C} + \mathbf{D} = 0 \quad [3.67]$$

de componentes:

$$\begin{aligned} A_{ji} &= \int_V N_j \mathbf{r} c N_i dV = \sum_{e=1}^{Ne} \int_{V_e} N_j^e \mathbf{r} c N_i^e dV_e \\ B_{ji} &= \int_V \tilde{\mathbf{N}} N_j \mathbf{k} \tilde{\mathbf{N}} N_i dV = \sum_{e=1}^{Ne} \int_{V_e} \tilde{\mathbf{N}} N_j^e \mathbf{k} \tilde{\mathbf{N}} N_i^e dV_e \\ C_j &= \int_V N_j f(\mathbf{r}, t) dV = \sum_{e=1}^{Ne} \int_{V_e} N_j^e f(\mathbf{r}, t) dV_e \\ D_j &= \int_S N_j q dS = \sum_{e=1}^{Ne} \int_{S_e} N_j^e q dS_e \end{aligned} \quad [3.68]$$

Además \mathbf{T} y $\dot{\mathbf{Q}}$ representan a los vectores de las temperaturas nodales y de sus derivadas temporales.

3.3.3 Discretización temporal

Existe una amplia variedad de algoritmos que nos permitirían insertar la dependencia temporal en la ecuación [3.67]. Destacamos algunos de ellos: Houbolt, Wilson, Euler, Crank-Nicholson, etc. Aquí únicamente describiremos el método de Newmark, empleado por ANSYSTM, por ser éste el programa que usamos en nuestra labor de investigación.

Con $\mathbf{q}_i(t)$ y $\dot{\mathbf{q}}_i(t)$ expresaremos la temperatura del nodo i en el tiempo t y su derivada temporal. El método de integración de Newmark, o regla del trapecio, se enuncia con la expresión (Bathe, 1996) (Huang, 1994)

$$\frac{\dot{\mathbf{q}}_i(t+\Delta t) + \dot{\mathbf{q}}_i(t)}{2} = \frac{\mathbf{q}_i(t+\Delta t) - \mathbf{q}_i(t)}{\Delta t} \quad [3.69]$$

donde Δt representa el tamaño de la discretización temporal. El significado de este paso de tiempo es el siguiente: los fundamentos del método variacional sólo permiten la solución estacionaria de una ecuación obligando a que el tiempo opere como un parámetro, es decir, resolveremos una ecuación para cada instante t ; la evolución temporal se construirá a partir de la distribución de temperaturas nodales en t , $\mathbf{q}(t)$, insertándola como una condición de contorno al resolver la ecuación en el instante $t + \Delta t$.

Con estas premisas buscamos la solución a la ecuación [3.67] para el instante $t + \Delta t$, es decir,

$$\mathbf{A}\dot{\mathbf{Q}}(t + \Delta t) + \mathbf{B}\mathbf{Q}(t + \Delta t) - \mathbf{C}(t + \Delta t) + \mathbf{D}(t + \Delta t) = 0 \quad [3.70]$$

donde suponemos que los vectores \mathbf{C} y \mathbf{D} pueden depender del tiempo. Al aplicar la regla del trapecio y reordenar los términos para separar las dos dependencias temporales obtenemos,

$$\left[\frac{2}{\Delta t} \mathbf{A} + \mathbf{B} \right] \mathbf{Q}(t + \Delta t) - \mathbf{C}(t + \Delta t) + \mathbf{D}(t + \Delta t) = \mathbf{A} \left[\frac{2}{\Delta t} \mathbf{Q}(t) + \dot{\mathbf{Q}}(t) \right] \quad [3.71]$$

ecuación que determina la distribución de temperatura en el instante $t + \Delta t$ a partir de la distribución de temperatura, y de su derivada, en el tiempo t .

Existen limitaciones al tamaño de la discretizaciones Δt que dependen de la morfología de la ecuación que define el problema físico. Estas restricciones se manifiestan por medio de relaciones adimensionales, que en el caso de la ecuación de la conducción

calorífica liga la extensión del paso temporal al tamaño de la discretización espacial mediante el número de Fourier,

$$Fo = \frac{rc}{K} \frac{\Delta x^2}{\Delta t} \quad [3.72]$$

Por último, hay que tener en cuenta un valor mínimo de operatividad de esta, u otra, relación que introduce el programa numérico. En el caso del código ANSYSTM el mínimo número de Fourier permitido es de 5.4.

3.3.4 Cambios de estado y de fase

En los tratamientos térmicos de los materiales se produce una gran variedad de transformaciones de fase. Subrayaremos las dos de mayor importancia en el caso del endurecimiento del acero.

Por un lado están los procesos de crecimiento martensítico, que dependen de un conjunto amplio de variables: temperatura, gradiente de temperatura, velocidad de enfriamiento, etc... . Este tipo de metamorfosis es complicada de tratar dentro de un algoritmo de elementos finitos. En cualquier caso la energía puesta en juego en la transformación es muy pequeña comparada, por ejemplo, con el calor latente de fusión (*Brown, 1992*).

El otro tipo de cambio de fase en el que nos fijaremos es la transición sólido-líquido-sólido. La completa comprensión de este fenómeno implica a varios procesos, el más significativo es la transferencia calorífica.

La forma más cómoda de insertar los cambios de fase en un modelo de elementos finitos es mediante el calor específico efectivo. Éste tomará valores diferentes en cada rango de temperatura (*Huang, 1994*) (*Lewis, 1996*):

$$\begin{aligned}c_{ef} &= \mathbf{rc} & T < T_s \\c_{ef} &= \mathbf{rc} + \frac{L}{T_L - T_s} & T_L < T < T_s \\c_{ef} &= \mathbf{rc} & T > T_L\end{aligned} \quad [3.73]$$

donde tanto la densidad como el calor específico son función de la temperatura. La dispersión del calor latente entre un rango restringido de temperaturas dificulta la convergencia del método de elementos finitos.

Bibliografía

- Abaqus/Standard User's Manual. Vol I. Versión 5.7* (1997); Hibbit, Karlsson & Sorensen.
- Álvarez, C. et al. (2001); *Real time control and monitoring of laser hardening process: applications to cylindrical workpieces*; Laser Assisted net Shape Engineering 3. Proceeding of the LANE 2001. Surface & Heat Treatment. 223-234.
- Ansys user's manual 5.0. Theory* (1994); Swanson Analysis Systems, Inc.
- Bathe, J-K. (1996); *Finite element procedures*; Prentice Hall.
- Brown, S., H. Song (1992); *Finite element simulation of welding of large structures*; Journal of Engineering for Industry, November, Vol. 114, pp. 441-451.
- Chen, D.H., Z.M. Zhang (2000); *Thermal analysis of the volume absorber in pulsed excimer laser calorimeters*; Int. J. Heat Mass Transfer, Vol. 43, pp. 3061-3072.
- Comini, G. et al. (1994); *Finite element analysis in heat transfer*; Taylor & Francis.
- Dai, K., L. Shaw (2001); *Thermal and stress modelling of multi-material laser processing*; Acta Materialia , 49 , 4171-4181.
- Dautray, R, J.L. Lions (1988); *Mathematical analysis and numerical methods for science and technology. Vol. 5*; Springer-Verlag.
- Deus, A.M., J. Mazumder; *Two-dimensional thermo-mechanical finite element model for laser cladding*.
- Dowden , J.M. (2001); *The mathematics of thermal modeling*; Chapman & Hall / CRC
- Eriksson, K. et al. (1996); *Computational differential equations*; Cambridge University Press.
- Frewin, M.R., D.A. Scott (1999); *Finite element model of pulsed laser welding*; Welding Research Supplement, January , pp. 15-s / 16-s.
- Galantucci, L.M., A. Gravina, L. Tricarico (1997); *Laser heat treatment using various overlapping degrees of the beam passes: a FEM transient analysis*; laser assisted net shape Eng. 2, Pro. LANE'97, pp. 659-698.
- Huang, H.C., A.S. Usmani (1994); *Finite element analysis for heat transfer*; Springer-Verlag.
- Johnson, C. (1978); *Numerical solution of partial differential equations by finite element method*; Cambrigde University Press.

- Koai, K. et al. (1993); *Heat transfer in laser hardening of rotating cylinders*; HTD-Vol. 159, Transport Phenomena in Nonconventional Manufacturing and Material Processing ASME 1993.
- Krasnov, M.L. et al. (1992); *Cálculo variacional*; Mir.
- Labudovic, M. et al (2000); *Three-dimensional finite element modelling of laser surface modification*; Proc. Instn. Mech. Engrs. Vol. 214 Part B, pp. 683-692.
- Lawrent'ev, M.A. (1963); *Variational methods for boundary value problems for systems of elliptic equations*; Dover.
- Lewis, R.W. et al. (1996); *The finite element method in heat transfer analysis*; John Wiley & Sons.
- Marsden, J.E., T.S. Ratin (1994); *Introduction to mechanics and symmetry*; Springer-Verlag.
- Ocaña, J.L. et al. (1998); *A 3D model for the predictive assessment of laser surface treatments*; Proc. of the 6th Int. Conf. on Welding and Melting by Electron and Laser Beams, Vol. 1, pp. 93-100.
- Prenter, P.M. (1989); *Spline and variational methods*; Wiley Classic Library
- Rey, J. (1988); *Los problemas lineales de la Física*; CSIC.
- Saavedra, E. Et al. (2000); *Predicción de la evolución de la temperatura durante el tratamiento térmico de materiales metálicos por láser*; Anales de la Ingeniería Mecánica. Año 13, Vol. 3, diciembre 2000, pp. 1759-1764.
- Thomé, V. (1997); *Galerkin finite element methods for parabolic problems*; Springer.
- Wang, K.F., S. Chandraseka, H.T.Y. Yang (1992); *Finite-element simulation of induction heat treatment*; JMEPEG, Vol. 1, pp. 97-112
- Woodhouse, N.M.J. (1990); *Introducción a la mecánica analítica*; Alianza Universidad Textos.
- Yáñez, A. et al. (2001); *Modelling of temperature evolution on metals during laser hardening process*; Applied Surface Science 186 (2002) 611-616
- Zienkiewicz, O.C., K. Morgan (1983); *Finite elements and approximation*; John Wiley & Sons

3.4 Transformaciones metalúrgicas en el sistema hierro-carbono

En el tratamiento térmico de los aceros se pueden producir una amplia variedad de alteraciones en la morfología del material y/o en su estructura interna, esto es lo que se conoce como transformaciones de fase. Para describir estos procesos se usan gráficas que representan la temperatura frente a la composición en carbono y otros metales y que reciben el nombre de diagramas de transformaciones en el equilibrio. En *Fig. 3.4* se ve el esquema de una de estas gráficas para el sistema multicomponente Fe-C-M, donde M simboliza cualquier combinación de Mn, Si, Ni, Cr, Mo, Cu, V, W, y Nb. (Victor, 1998).

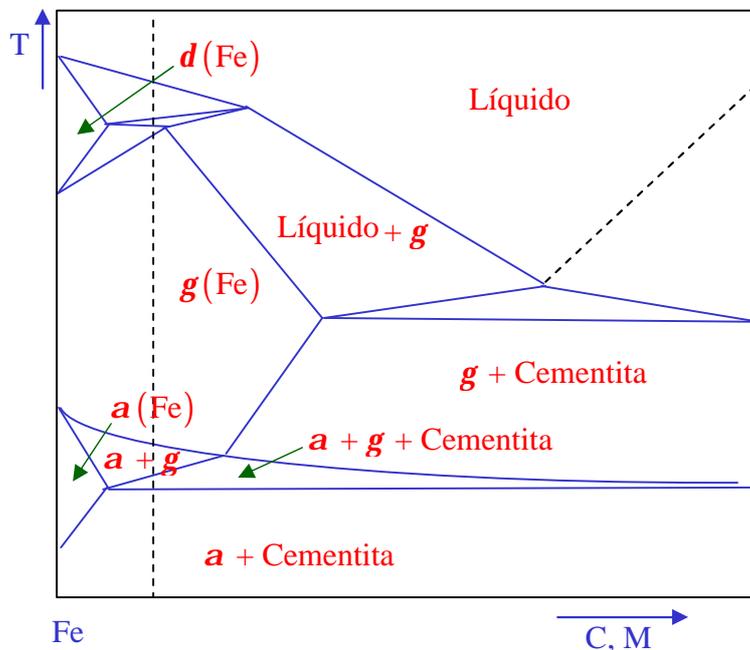


Fig. 3.4 Esquema de un diagrama de fases en el equilibrio del sistema Fe-C-M. La línea vertical separa los aceros en hipoeutectoides e hipereutectoides

El valor de la concentración de carbono divide el diagrama 3.4 en dos partes: $C < 2\%$ para los aceros y $C > 2\%$ para los hierros fundidos. El primer tramo puede subdividirse en otros dos: los aceros que contienen menos del 0.8% se denominan hipoeutectoides, en tanto que los que están del 0.8 al 2% reciben el nombre de hipereutectoides. En este trabajo nos centraremos en los aceros hipoeutectoides.

3. Estudio teórico do tratamento térmico de materiais

La figura 3.4 muestra que fases están presentes en un equilibrio para diferentes combinaciones de temperatura y de concentración de carbono. Algunas son:

- La ferrita es una solución sólida constituida por las fases **a** o **d** del hierro y trazas de carbono. Es muy blanda pero dúctil y maleable.
- La austenita es una disolución sólida de carbono en la fase **g** del hierro también muy blanda, dúctil y tenaz. En algunas ocasiones aparece a temperatura ambiente.
- La cementita (Fe_3C) tiene una estructura cristalina ortorómbica lo que le da una configuración con una dureza elevada pero muy frágil. Esta fase metaestable al descomponerse produce grafito.
- La perlita es una mezcla eutectoide que consiste en placas alternas de cementita y ferrita. También es metaestable.

Las transformaciones entre distintas fases quedan delimitadas por temperaturas que marcan el inicio y la conclusión de la metamorfosis. Estas temperaturas representadas en condiciones de equilibrio como líneas sencillas, se desdoblan durante un calentamiento o durante un enfriamiento. Algunas de estas temperaturas son:

- T_{Ac1} o temperatura eutectoide. Es la mínima temperatura que es necesario alcanzar durante el calentamiento del acero para que comience la formación de austenita.
- T_{Ac3} . Se considera como la temperatura, durante el período de calentamiento, en que la formación de austenita está completa.
- T_{Ar3} . Durante el enfriamiento marca el inicio de la formación de la ferrita o ferrita + cementita a partir de la austenita.

- T_{Ar1} o temperatura de transformación completa. Delimita el valor de la temperatura para el que se completó la conversión austenita \rightarrow ferrita o austenita \rightarrow cementita.

Diagramas de transformación

Bajo la designación del término temple se engloba un conjunto de transformaciones de fase que implican tanto al calentamiento como al enfriamiento del material. Los aspectos cinéticos de estas modificaciones en la estructura interna del material son muy importantes a la hora de explicar la presencia de la fase martensítica en la aleación tratada.

Los diagramas de transformación describen, en función del tiempo, los cambios que ocurren durante el proceso. Durante la formación de la martensita a partir de la ferrita, perlita o de la martensita revenida disminuye el volumen de la probeta calentada, existe entonces una relación entre la presencia de las fase del metal, el volumen de grano y la dilatación de la muestra. Cuatro son los tipos de diagramas, aunque pueden quedar englobados en dos grupos:

- Diagramas de transformaciones isotérmicas. Estos diagramas muestran lo que le ocurre al acero cuando mantiene su temperatura constante durante un período prolongado de tiempo. Dentro de este grupo distinguiremos:
 - IT (Isothermal Transformation). Permiten conocer en que instante comienza o finaliza la formación de la austenita, siendo muy útiles en tratamientos térmicos rápidos como el temple con láser.
 - TTT (Time Temperature Transformation). Tomando como punto de partida una temperatura con un valor superior al de T_{Ac3} se enfría el acero hasta un valor deseado. Sobre un sistema de referencia temperatura-tempo se describen las curvas de la fracción isovolúmica transformada a partir de la austenita (gráficas que tienen perfil de C). En los dos extremos se representan las conversiones austenita \rightarrow perlita (altas temperaturas) y

3. Estudio teórico do tratamento térmico de materiais

austenita → bainita (bajas temperaturas). En la gráficas 3.5 se ve un ejemplo, M_S representa la temperatura de inicio de la formación de martensita.

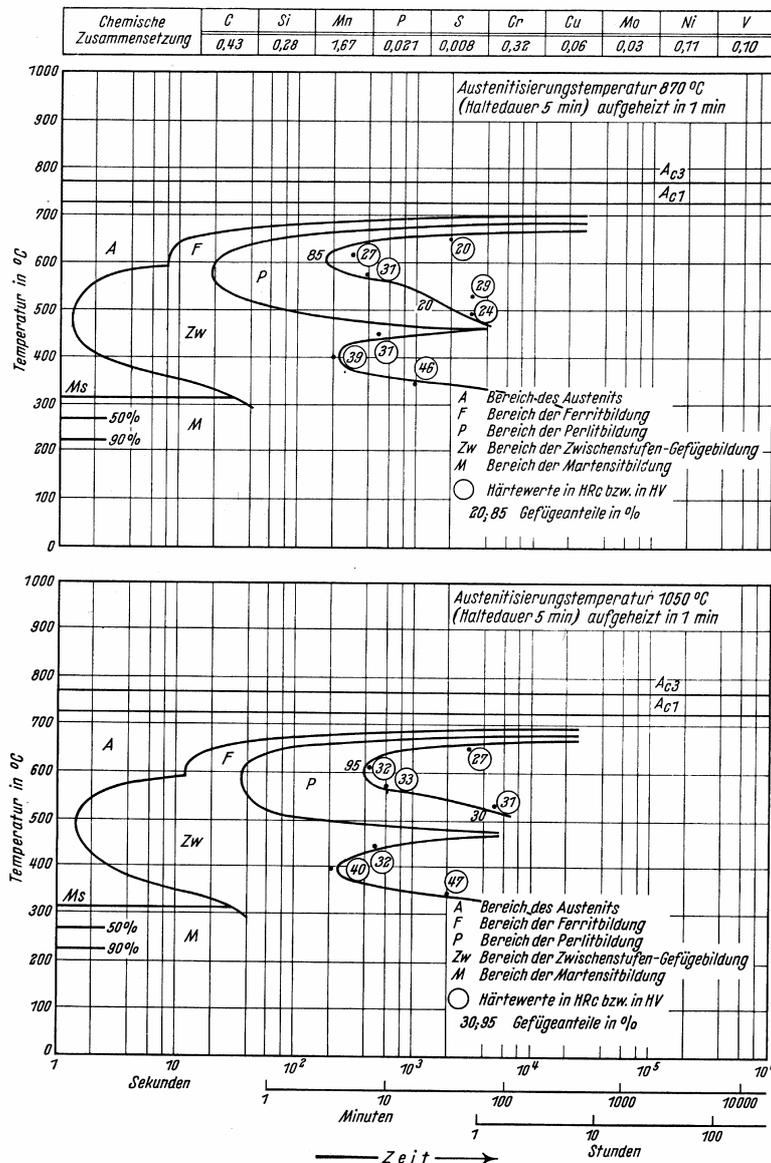


Fig. 3.5 Ejemplo de diagramas de transformación austenita → perlita (para temperaturas entre A_{c1} y 600°C) y austenita → bainita (para temperaturas entre 600°C y M_s) (ASM, 1991).

- Diagramas de calentamiento y enfriamiento continuo. En los casos prácticos de tratamientos térmicos casi no se encuentran situaciones en las que se mantenga constante la temperatura. Una alternativa a los diagramas de transformaciones isoterma consiste en calentar o enfriar continuamente la muestra estudiada y medir la dilatación para sucesivos valores de la temperatura dando lugar a dos tipos de representaciones gráficas:

3.4. Transformaciones metalúrgicas en el sistema hierro-carbono

- CHT (Continuous Heating Transformation). Diagramas de transformación por calentamiento continuo.

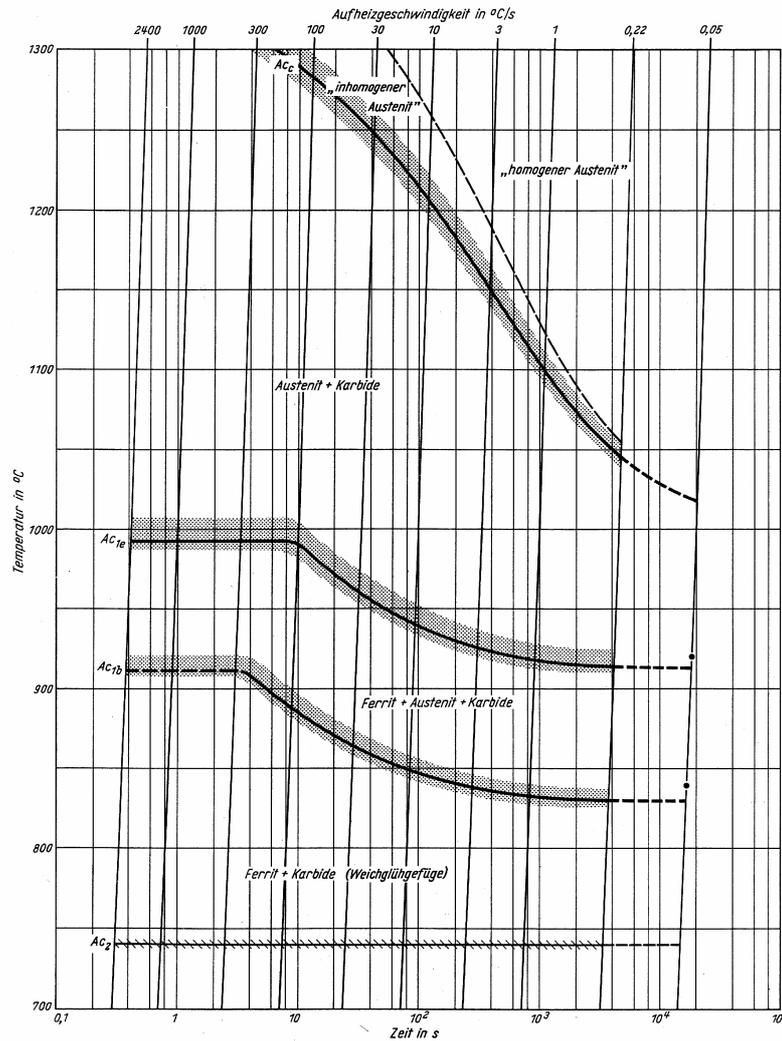


Fig. 3.6 Ejemplo de diagrama CHT para el acero X38CrMoV 5.1 (ASM, 1991)

- CCT (Continuous Cooling Transformation). Diagramas de transformación por enfriamiento continuo.

Para acabar con este apartado es necesario puntualizar que estos diagramas son muy sensibles a la composición exacta de la aleación (ASM, 1991).

Bibliografía

ASM Handbook, (1991); *Heat treating*; ASM International, Volume 4.

Caballero, F.G. et al. (2001); *Modelización del proceso de austenización de un acero eutectoide*; Rev. Metal. Madrid 37 pp. 573-581.

Callister, W.D. (2000); *Ciencia e ingeniería de los materiales*; Editorial Reverté, S.A.

Stüdeman, H. (1980); *Tratamientos térmicos de los aceros*; URMO, S.A. de Ediciones.

Victor Li, M. et al. (1998); *A computational model for the prediction of steel hardenability*; Metallurgical and Materials Transactions B, Vol. 29B, pp. 661-672.

Capítulo 4

Desarrollo de un modelo de tratamiento térmico con láser

4.1. Modelos analíticos

4.1.1. Método de las imágenes

4.1.1.1. Geometría plana: placas

4.1.1.2. Geometría plana: tubos

4.1.1.3. Caracterización del método de las imágenes

4.1.2. Aplicación del método de las imágenes

4.1.2.1. Haz rectangular estacionario

4.1.2.2. Modo TEM_{01}^ en movimiento*

4.1.3. Análisis adimensional

4.2. Modelos de elementos finitos

4.2.1. Mallado

4.2.2. Geometrías

4.2.3. Discretización del haz

4.2.4. Errores introducidos con la discretización

4.3. Transformaciones metalúrgicas

En este capítulo estudiaremos dos métodos analíticos que servirán tanto para la búsqueda de los parámetros del proceso de temple como para aportar soluciones que sirvan de referencia a la hora de calibrar los resultados obtenidos numéricamente. Estos dos modelos serán el método de las imágenes (que hace uso de la condición de perpendicularidad en las isotermas en los límites de la geometría) y el análisis adimensional.

Para hacer frente a nuestras necesidades de investigación se construyó un programa que, a modo de intérprete, facilita aplicar la técnica de los elementos finitos y permite estudiar y controlar los errores del modelo. Con esta herramienta se hizo un estudio sobre la influencia de las distintas discretizaciones geométricas sobre el error del resultado.

Por último estudiaremos como se traducir los ciclos térmicos obtenidos con la simulación en diagramas de fases, primero, y posteriormente en mapas de dureza.

4.1 Modelos analíticos

En este apartado partiendo de las soluciones encontradas haciendo uso de la función de Green buscaremos:

- Limitar los propagadores sobre contornos infinitos a medios finitos, pero con condiciones de simetrías en los límites (método de las imágenes).
- Aplicar este procedimiento para obtener dos soluciones concretas del campo de temperaturas sobre una placa: haz estacionario rectangular uniforme y modo TEM₀₁*.
- Reducir el número de cálculos y facilitar la elección de los parámetros del proceso de temple por medio del análisis dimensional.

4.1.1 Método de las imágenes

El método de las imágenes permite construir la función de Green para substancias materiales con límites geométricos. Nos centraremos en dos geometrías: plana y cilíndrica

4.1.1.1 Geometría plana: placas

Comenzaremos con el estudio de una fuente puntual estacionaria que actúa sobre un medio material plano e infinito en las direcciones X e Y , pero restringido por $z = h$ y $z = 0$. En estas circunstancias el plano $z = h$ es una adiabática, lo que es igual que decir que las isothermas son normales a la superficie.

$$q_z(z = h) = 0 \Rightarrow \left. \frac{\partial T}{\partial z} \right|_{z=h} = 0 \quad [4.1]$$

Ahora bien, la definición de la función de Green permite establecer que la relación anterior es equivalente a:

$$\left. \frac{\partial G_z}{\partial z} \right|_{z=h} = 0 \quad [4.2]$$

Además, la implantación de la fuente aporta otra condición sobre el plano $z = 0$,

$$\left. \frac{\partial G_z(z)}{\partial z} \right|_{z=0^+} = 0 \quad [4.3]$$

Se puede conseguir que se cumpla la condición [4.2] añadiendo una fuente ficticia (imagen) en $z = 2h$,

$$G_z = \frac{1}{\sqrt{4pa(t-t')}} \left[\exp \left\{ -\frac{z^2}{4a(t-t')} \right\} + \exp \left\{ -\frac{(z-2h)^2}{4a(t-t')} \right\} \right] \quad [4.4]$$

Ahora bien, para restablecer el cumplimiento del requisito [4.3] es necesario introducir una nueva imagen en $z = -2h$,

$$G_z = \frac{1}{\sqrt{4pa(t-t')}} \left[\exp \left\{ -\frac{z^2}{4a(t-t')} \right\} + \exp \left\{ -\frac{(z-2h)^2}{4a(t-t')} \right\} + \exp \left\{ -\frac{(z+2h)^2}{4a(t-t')} \right\} \right] \quad [4.5]$$

Esta continua adición de términos conduce a una solución en forma de serie,

$$G_z = \frac{1}{\sqrt{4pa(t-t')}} \sum_{n=-\infty}^{+\infty} \exp \left\{ -\frac{(z+2nh)^2}{4a(t-t')} \right\} \quad [4.6]$$

Si queremos limitar las dimensiones x e y procederemos de manera semejante. Supongamos que el origen de coordenadas se encuentra en el centro de la pieza, el término G_y de la función de Green:

$$G_y = \frac{1}{\sqrt{4pa(t-t')}} \exp \left\{ -\frac{(y-y')^2}{4a(t-t')} \right\} \quad [4.7]$$

Si el medio está limitado por $y = \pm b$ las condiciones de contorno son análogas a [4.2]:

$$\left. \frac{\partial G_y}{\partial y} \right|_{y=b} = 0 \quad \left. \frac{\partial G_y}{\partial y} \right|_{y=-b} = 0 \quad [4.8]$$

Para que se cumplan simultáneamente las dos condiciones introduciremos fuentes imágenes simétricas respecto a los planos $y = \pm b$, como muestra la siguiente figura:

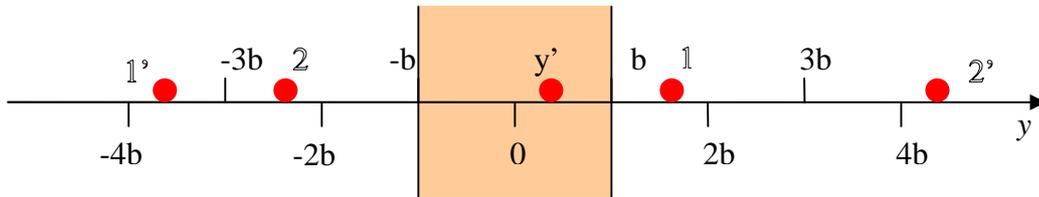


Fig. 4.1 Fuente originaria en y' y simétricas (1 y 2) respecto a $\pm b$. La fuente 1' es simétrica de 1 respecto de $-b$, y la 2', la simétrica de 2 respecto de b .

La contribución de todas las fuentes conforma una serie:

$$G_y = \frac{1}{\sqrt{4pa(t-t')}} \sum_{n=-\infty}^{\infty} \exp \left\{ -\frac{\left(y - [(-1)^n y' + 2nb] \right)^2}{4a(t-t')} \right\} \quad [4.9]$$

De la misma manera, si los bordes de la pieza en la dirección del eje X se sitúan en los planos $x = \pm a$ la contribución tanto de la fuente como de sus imágenes es:

$$G_x = \frac{1}{\sqrt{4pa(t-t')}} \sum_{n=-\infty}^{\infty} \exp \left\{ -\frac{\left(x - [(-1)^n x' + 2na] \right)^2}{4a(t-t')} \right\} \quad [4.10]$$

4.1.1.2 Geometría cilíndrica: tubos

Para construir una aproximación a la función de Green de un cilindro hueco, de espesor h pequeño comparado con su radio R , podemos hacer uso del procedimiento anterior (Álvarez, 2001). Fijando la longitud del cilindro en $2pR$, construimos una pieza plana limitada por $x = \pm pR$, $y = \pm b$, $z = h$ y $z = 0$. Para seguir aplicando la solución de la geometría plana es necesario cumplir dos condiciones:

- Debe existir una periodicidad en el campo de temperaturas $T(x, y, z, t) = T(x + 2pR, y, z, t)$.
- Debe existir continuidad entre el flujo emergente de un plano y el flujo entrante en el plano consecutivo.

La función que satisface estas circunstancias es:

$$G_x = \frac{1}{\sqrt{4pa(t-t')}} \sum_{n=-\infty}^{\infty} \exp \left\{ -\frac{\left(x - \left[(-1)^n x' + 2npR \right] \right)^2}{4a(t-t')} \right\} \quad [4.11]$$

4.1.1.3 Caracterización del método de las imágenes

Convergencia de la serie

La aplicación del método de las imágenes implica la manipulación de una suma de infinitos términos. Afortunadamente no todos los sumandos contribuyen por igual. Para tener una idea del comportamiento de estas series haremos un estudio de otra comparable a las anteriores:

$$H = \sum_{n=-\infty}^{\infty} \exp \left(-\frac{(n-n_0)^2}{4at/a^2} \right) \quad [4.12]$$

La aplicación del método de la integral nos indica que en cada instante t la serie converge a:

$$H \approx \int_{-\infty}^{+\infty} \exp\left(-\frac{(n-n_0)^2}{4at/a^2}\right) dn = \frac{2\sqrt{apt}}{a} \quad [4.13]$$

Es decir, en cada instante t la serie se comporta como una gaussiana de anchura

$$w = \frac{\sqrt{8at}}{a} \quad [4.14]$$

Así, en H , el número de sumandos que debemos considerar dependerá del criterio que se adopte. Para que la contribución del sumatorio sea del 95% de H debemos escoger una cantidad de términos igual al entero más próximo a $2w+1$. Si estimamos necesario el 99.5% de H , el límite debe extenderse hasta el entero impar más próximo a $3w$. A modo de resumen:

H	Extensión de H
$0.95 H$	$\sum_{n=-\sqrt{8at}/a}^{\sqrt{8at}/a} \exp\left(-\frac{(n-n_0)^2}{4at}\right)$
$0.995 H$	$\sum_{n=-1.5\sqrt{8at}/a}^{1.5\sqrt{8at}/a} \exp\left(-\frac{(n-n_0)^2}{4at}\right)$

[4.15]

Como ejemplo podemos considerar el caso en que $t = 1$, $a = 1/4$, $n_0 = 0$ y $a = 1$. Con estos valores la anchura de la gaussiana será de $w = \sqrt{2}$. Para que la serie englobe a más del 99.5% de la suma el número de términos debe ser de 5, desde -2 a 2. En la tabla 4.2, donde están representados algunos de los términos de esta serie y su contribución, se puede verificar lo anteriormente expuesto. Una representación gráfica (Fig. 4.3) nos permite comprobar que H , además de converger, en esencia está constituida por los términos más próximos al valor central $n = 0$.

Las conclusiones que se sacan de este ejemplo son tres:

4. Desarrollo de un modelo de tratamiento térmico con láser

- el número de términos de la serie a considerar, a los que podemos denominar reflexiones, aumenta según crece el tiempo [ec. 2.14].
- La cantidad de imágenes que se deben emplear es inversamente proporcional al tamaño geométrico del intervalo de integración $[-a, a]$.
- No todos los sumandos contribuyen por igual.

n	H	%
-3	0.0001	0.01
-2	0.0184	1.03
-1	0.3863	20.75
0	1.3863	56.41
1	1.7542	20.75
2	1.7725	1.03
3	1.7726	0.01
4	1.7726	$7.10 \cdot 10^{-6}$

Tab. 4.2 Serie H y el peso específico de cada término.

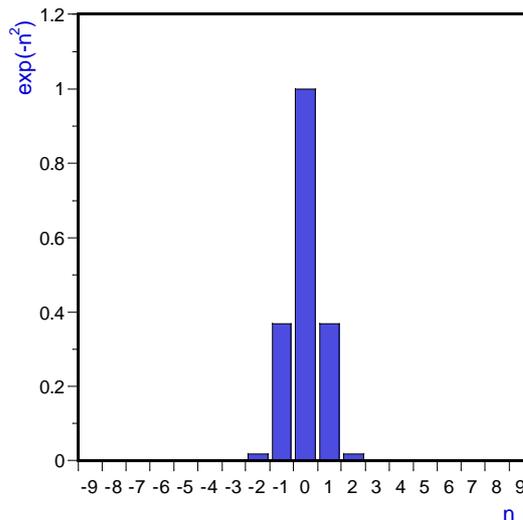


Fig. 4.3 Valor de los términos de H.

Caracterización del método de las imágenes: anchura y área

Supongamos una fuente puntual situada en $(x', 0, 0)$ sobre una pieza infinita en las direcciones Z e Y pero limitada por los planos $x = \pm a$. La función de Green es:

$$G_x = \frac{1}{\sqrt{4pa(t-t')}} \sum_{n_x=-\infty}^{\infty} \exp \left\{ -\frac{\left(x - \left[(-1)^n x' + 2n_x a \right] \right)^2}{4a(t-t')} \right\} \quad [4.16]$$

Parémonos a estudiar el significado de esta función. La exponencial que aparece representa en cada instante una gaussiana de anchura

$$w = \frac{\sqrt{8a(t-t')}}{a} \quad [4.17]$$

Como puede observarse esta dimensión, que es una característica de la función normal, depende del tiempo y del tamaño de la pieza.

El otro elemento que llama nuestra atención es el divisor que hay delante del sumatorio. Para identificarlo sustuiremos la suma por una integral extendida a todas las imágenes

$$G_x = \frac{1}{\sqrt{4pa(t-t')}} \int_{-\infty}^{\infty} \exp \left\{ -\frac{\left(x - [(-1)^n x' + 2n_x a] \right)^2}{4a(t-t')} \right\} dn_x \quad [4.18]$$

Es evidente, entonces, que el término

$$A_x = \frac{\sqrt{pa(t-t')}}{a} \quad [4.19]$$

representa el área de la integral. De aquí se deducen dos cosas:

1. Al ser A_x un área que depende de una raíz cuadrada, el resultado de las operaciones con las magnitudes que están dentro de la raíz debe ser mayor que cero. Como resultado de esto el tiempo asociado al punto donde se mide la temperatura debe ser mayor que el asociado a la fuente.

$$t > t' \quad [4.20]$$

Este resultado no debe sorprendernos ya que está implícito en la definición de la función de Green $G_x(x, x', t, t')$.

2. El área A_x , para cada valor de $t-t'$ es constante, cuanto más grandes (pequeñas) sean las dimensiones de la probeta más estrecha (ancha) será A_x con lo que el número de imágenes será menor (mayor).

4. Desarrollo de un modelo de tratamiento térmico con láser

Como quiera que tanto el área como la anchura dependen de la diferencia $t-t'$, cuanto mayor (menor) sea ésta, mayor (menor) será el número de imágenes que contribuyen significativamente en la expresión [4.16].

Estos dos enunciados establecen un principio que podríamos llamar de mínima causalidad: aunque que la distribución de temperaturas que se deduce de la aplicación del método de las imágenes aparece simultáneamente en todos los puntos del espacio cuando la fuente comienza a actuar, no tiene sentido estudiar los casos en los que $t \leq t'$. Hay que destacar que a este resultado se llega sin definir una velocidad de propagación del calor.

Caracterización del método de las imágenes: contribución de cada término

Retomemos la expresión del propagador para una fuente puntual [4.16]. Al introducir la constante de normalización dentro del sumatorio, los cocientes que obtenemos cuantifican la contribución de cada término en la serie. Como paradigma de comportamiento fijémonos en el sumando central ($n=0$) y calculemos su límite cuando $(t-t') \rightarrow \infty$, si $x \neq x'$, es decir, vamos a estudiar como evoluciona este término según nos alejamos temporalmente de la influencia de la fuente

$$\lim_{(t-t') \rightarrow \infty} G_x \Big|_{n_x=0} = \lim_{\substack{(t-t') \rightarrow \infty \\ n_x=0}} \frac{1}{\sqrt{4pa(t-t')}} \exp \left\{ -\frac{(x-x')^2}{4a(t-t')} \right\} = 0 \quad [4.21]$$

También vemos que, tomando $t-t' = cte$, los demás términos de la serie tienden a cero

$$\lim_{n_x \rightarrow \infty} G_x \Big|_{t-t'=cte} = \lim_{\substack{n_x \rightarrow \infty \\ t-t'=cte}} \frac{1}{\sqrt{4pa(t-t')}} \exp \left\{ -\frac{\left(x - \left[(-1)^n x' + 2n_x a \right] \right)^2}{4a(t-t')} \right\} = 0 \quad [4.22]$$

Estos resultados significan que según $(t-t') \rightarrow \infty$ el valor de los sumandos disminuye. En la gráfica 4.4 se ve la evolución del término central [4.21]. El máximo se alcanza cuando $t-t' = (x-x')^2 / 2a$

Ahora bien, ya que tanto el área como la anchura de la gaussiana aumentan con el tiempo, en el límite $(t-t') \rightarrow \infty$ la serie estaría formada por infinitos términos con valor casi nulo pero que en conjunto definirían una superficie de medida infinita. Por ejemplo, para el caso en el que la fuente f sea constante, teniendo en cuenta que la exponencial crece más rápido que la constante $\sqrt{4pa(t-t')}$, la temperatura tenderá hacia

$$\lim_{(t-t') \rightarrow \infty} T|_{f=cte} \rightarrow \infty \quad [4.23]$$

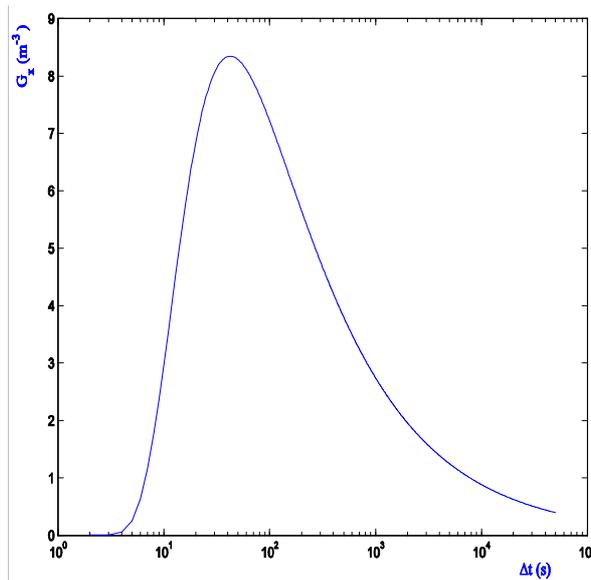


Fig. 4.4 Evolución del término central de la serie ($n = 0$) con el tiempo. Esta curva está construida tomando $a = 1.02 \cdot 10^{-5} \text{ m}^2 \text{ s}^{-1}$ y $x-x' = 29 \text{ mm}$.

Estudio sobre el número de imágenes necesarias: n grade

Vamos a centrarnos ahora en el estudio del número de imágenes que tenemos que usar. Primeramente hay que definir que significa que n sea grande.

La máxima separación en la dirección X que puede haber entre la fuente y el punto en el que calculamos la temperatura es la distancia entre bordes

$$\text{abs}(x - x')|_{\text{max}} = 2a \quad [4.24]$$

Sustituyendo esta expresión en la función de Green en ese eje

$$G_x = \frac{1}{\sqrt{4pa(t-t')}} \sum_{n_x=-\infty}^{\infty} \exp\left\{-\frac{(2a-2n_x a)^2}{4a(t-t')}\right\} \quad [4.25]$$

Al desarrollar el numerador de la exponencial

$$(2a-2n_x a)^2 = (2a)^2 + 2n_x a[2n_x a - 4a] \quad [4.26]$$

Se ve fácilmente que a partir de $n_x = |\pm 3|$ comienzan a dominar los términos asociados a las imágenes. Es decir, podemos considerar que el número de imágenes es grande cuando $-3 \geq n_x \geq 3$.

Aplicamos esto. Para un número grande de reflexiones podemos aproximar la expresión del propagador [4.16] en la dirección X por:

$$G_x \approx \frac{1}{\sqrt{4pa(t-t')}} \sum_{n_x=-\infty}^{\infty} \exp\left\{-\frac{(2n_x a)^2}{4a(t-t')}\right\} \quad [4.27]$$

Recortando la serie en N_x términos la función de Green queda

$$G_x \approx \frac{\sum_{n_x=-N_x}^{N_x} \exp\left\{-\frac{(2n_x a)^2}{4a(t-t')}\right\}}{\sqrt{4pa(t-t')}} \approx \frac{\int_{-N_x}^{N_x} \exp\left\{-\frac{(2n_x a)^2}{4a(t-t')}\right\} dn_x}{2a \int_{-\infty}^{\infty} \exp\left\{-\frac{(n_x a)^2}{4a(t-t')}\right\} dn_x} \quad [4.28]$$

$$G_x \approx \frac{1}{2a} \operatorname{erf}\left(\frac{N_x}{\sqrt{a(t-t')/a}}\right)$$

La función error es conocida y está tabulada (*Carslaw, 1992*). Algunos valores de $N_x / \left[\sqrt{a(t-t')/a}\right]$ se pueden ver en la siguiente tabla

$\mathbf{x} = N_x / \left[\sqrt{\mathbf{a}(t-t')/a} \right]$	$\text{erf}(\mathbf{x})$
1	0.842701
2	0.995322
3	0.999978

[4.29]

Para una placa de dimensiones $2a \times 2b \times h$ la función de Green, con un número grande de reflexiones, se puede aproximar por

$$G \approx \frac{1}{[4pa(t-t')]^{\frac{3}{2}}} \sum_{n_x=-\infty}^{\infty} \sum_{n_y=-\infty}^{\infty} \sum_{n_z=-\infty}^{\infty} \exp \left\{ -\frac{(2n_x a)^2 + (2n_y b)^2 + (2n_z h)^2}{4a(t-t')} \right\} \quad [4.30]$$

Siguiendo el mismo procedimiento que en [4.28] obtenemos como resultado

$$G \approx \frac{1}{2a2b2h} \text{erf} \left(\frac{N_x}{\sqrt{\mathbf{a}(t-t')/a}} \right) \text{erf} \left(\frac{N_y}{\sqrt{\mathbf{a}(t-t')/b}} \right) \text{erf} \left(\frac{N_z}{\sqrt{\mathbf{a}(t-t')/h}} \right) \quad [4.31]$$

Concluimos entonces que también influyen las dimensiones de la pieza (intervalo de integración) en el número de imágenes: cuanto mayor sea su volumen, menor será el número de reflexiones necesarias.

Además el tiempo t actúa de forma dinámica sobre los N_i : en cada instante es necesario un número determinado de imágenes. Para demostrar esta afirmación vamos a trabajar con la expresión [4.29] escogiendo una precisión del 99.99% ($x=3$).

$$N_x = \frac{3}{a} \sqrt{\mathbf{a}(t-t')} \quad [4.32]$$

El número de imágenes necesario para t_1 será N_1 . Para un instante $t_2 > t_1$ se necesitarán $N_2 > N_1$ reflexiones. Así, si quisiéramos representar la curva de la temperatura frente al tiempo deberíamos calcular para cada t_i el número N_i . Además, en un instante t el número de reflexiones es inversamente proporcional a las dimensiones del entorno de integración a .

4. Desarrollo de un modelo de tratamiento térmico con láser

Llevando el número de imágenes a la expresión del área y de la anchura en función del tiempo, llegamos a

$$\begin{aligned} A_x &= \frac{\sqrt{p}}{3} N_x \\ \mathbf{w}_x &= \frac{\sqrt{2}}{3} N_x \end{aligned} \quad [4.33]$$

Para un intervalo concreto $t-t'$, tanto el área como la anchura de la gaussiana son proporcionales al número de imágenes.

Otro resultado va a confirmarnos la tendencia de la contribución de las fuentes. Para un número grande de reflexiones la expresión [4.22], el límite de la función de Green, se puede aproximar por

$$\lim_{n_x \rightarrow \infty} G_x \Big|_{t-t'=cte} \approx \lim_{\substack{n_x \rightarrow \infty \\ t-t'=cte}} \frac{1}{\sqrt{4pa}(t-t')} \exp \left\{ -\frac{(2n_x a)^2}{4a(t-t')} \right\} \quad [4.34]$$

Al sustituir el valor del número de imágenes [4.32], considerando una precisión del 99.99%, obtenemos

$$\lim_{n_x \rightarrow \infty} G_x \Big|_{t-t'=cte} \approx \frac{e^{-9}}{\sqrt{4p} a N_x / 3} \approx 0 \quad [4.35]$$

El numerador confirma que para un gran número de imágenes los términos tienden hacia el valor cero. Por el contrario, el denominador, que representa la contribución total, se hace grande, es decir, la serie estaría compuesta de un número muy extenso de reflexiones que independientemente tienen una aportación casi nula mas en conjunto su contribución es muy importante.

Error de la aproximación

Por último, para un número grande de reflexiones el error cometido al recortar la serie será

$$e = 1 - \frac{1}{2V} \operatorname{erf} \left(\frac{N_x}{\sqrt{a(t-t')/a}} \right) \operatorname{erf} \left(\frac{N_y}{\sqrt{a(t-t')/b}} \right) \operatorname{erf} \left(\frac{N_z}{\sqrt{a(t-t')/h}} \right) \quad [4.36]$$

Donde $V = 2a \times 2b \times h$ representa el volumen sobre el que se integra la función de Green.

Fuentes en movimiento (1): velocidad perpendicular a las imágenes

En estos dos apartados construiremos y analizaremos los propagadores en sendas situaciones en las que introduciremos fuentes puntuales que se mueven con velocidad v relativa a la pieza.

Consideremos primeramente el caso de una fuente puntual que con velocidad constante ilumina un medio infinito en la dirección de movimiento, pero limitado por $x = \pm a$ en el eje perpendicular (Fig. 4.5). La función de Green con imágenes asociada a este problema es:

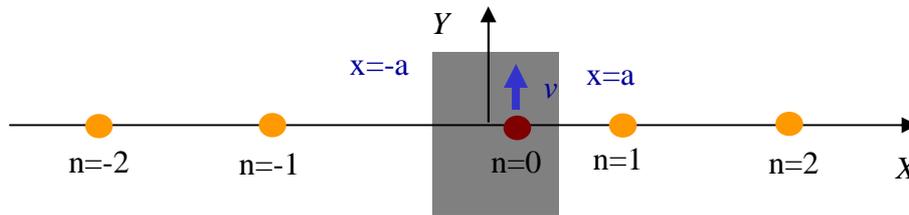


Fig. 4.5 La fuente (en rojo) se mueve perpendicularmente a las imágenes (en amarillo).

$$G = \frac{1}{(4pa(t-t'))^{3/2}} \sum_{n=-\infty}^{\infty} \exp \left\{ - \frac{\left(x - [(-1)^n x' + 2na] \right)^2 + (y - y')^2 + (z - z')^2}{4a(t-t')} \right\} \quad [4.37]$$

Tomando como dirección de movimiento el eje Y, la segunda coordenada se transforma según $y' \rightarrow y' + vt'$. Además buscaremos la temperatura en un punto sobre el plano $z = 0$. Bajo estas condiciones la función de Green queda

$$G = \frac{1}{(4pa(t-t'))^{3/2}} \sum_{n=-\infty}^{\infty} \exp \left\{ -\frac{\left(x - [(-1)^n x' + 2na] \right)^2 + (y - [y' + vt'])^2}{4a(t-t')} \right\} \quad [4.38]$$

Al igual que ya hiciéramos con anterioridad estudiaremos, por paradigmático, la evolución con el tiempo del término central, $n = 0$. Consideraremos dos situaciones, una en la que un punto quedará fijo respecto a la fuente y otra donde el punto se mueve solidariamente con ella.

En este primer caso examinaremos como evoluciona la función de Green según aumenta la diferencia temporal $t - t'$ para un punto fijo de coordenadas $(a/4, \pm a/4, 0)$ (Fig. 4.5).

$$G|_{n=0} = \frac{1}{(4pa(t-t'))^{3/2}} \exp \left\{ -\frac{(a/4)^2 + (\pm a/4 - vt')^2}{4a(t-t')} \right\} \quad [4.39]$$

Manteniendo fijo el tiempo de acción de la fuente t' , este propagador tiene un máximo en

$$t = t' + \frac{(a/4)^2 + (\pm a/4 - vt')^2}{6a} \quad [4.40]$$

En la gráfica 4.5 se representa la evolución con el tiempo t de tres funciones de Green del término central, $G(n = 0)$, fijando $t' = 1$ s. Tomando como referencia la expresión [4.39] cuando la velocidad de la fuente es nula (curva central), se observa que para un punto $(a/4, a/4, 0)$ situado en el sentido de movimiento de la fuente el valor del propagador es mucho mayor que para las coordenadas $(a/4, -a/4, 0)$ que quedan hacia atrás, (curvas en azul y verde respectivamente).

Las curvas (Fig. 4.6) están construidas con una velocidad típica de un tratamiento de temple. Al manejar un número de Peclet ($Pe = 56.91$) mucho mayor que la unidad dominarán los efectos del movimiento de la fuente sobre la difusión del calor. De la ecuación [4.40] se deduce que para velocidades suficientemente bajas como para que el número de Peclet sea menor que uno no existen diferencias entre los máximos, tanto si

el punto está delante de la fuente, como si está detrás.

La gráfica (4.7) representa la evolución con el tiempo de la expresión [4.39] para un punto que se mueve con velocidad v . Se observa que cuando la difusividad térmica hace patente su dominio sobre la traslación de la fuente ($Pe = 0.5681$) la contribución del propagador es mucho mayor que en el caso de preponderar la velocidad sobre la difusividad ($Pe = 2.8450$).

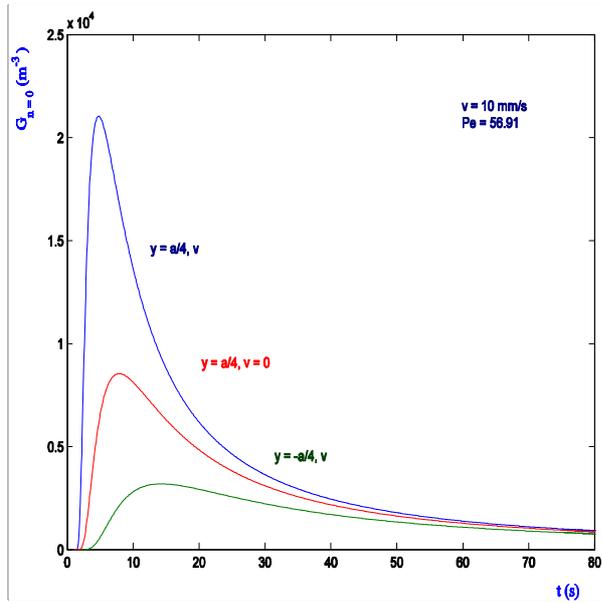


Fig. 4.6 Evolución temporal del término $G(n = 0)$ para un punto delante de la fuente (azul), otro detrás (verde) y cuando la fuente está quieta (rojo)

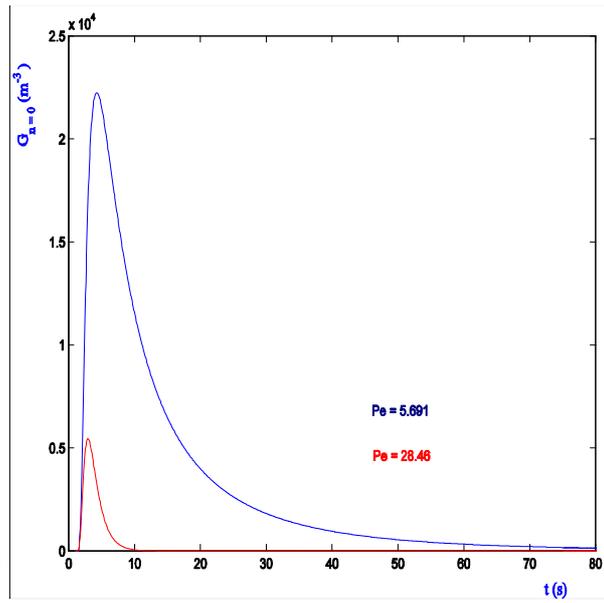


Fig. 4.7 Evolución temporal del término $G(n = 0)$ para dos números de Peclet

Fuentes en movimiento (2): velocidad paralela a las imágenes

Supongamos que en las mismas condiciones que el anterior caso la fuente se mueve en la dirección del eje X ($x' \rightarrow x' + vt'$). Escogiendo las coordenadas $(x, 0, 0)$ como el punto donde queremos medir la temperatura, la expresión de la función de Green es,

$$G = \frac{1}{(4pa(t-t'))^{3/2}} \sum_{n=-\infty}^{\infty} \exp \left\{ -\frac{\left(x - \left[(-1)^n (x' + vt') + 2na \right] \right)^2}{4a(t-t')} \right\} \quad [4.41]$$

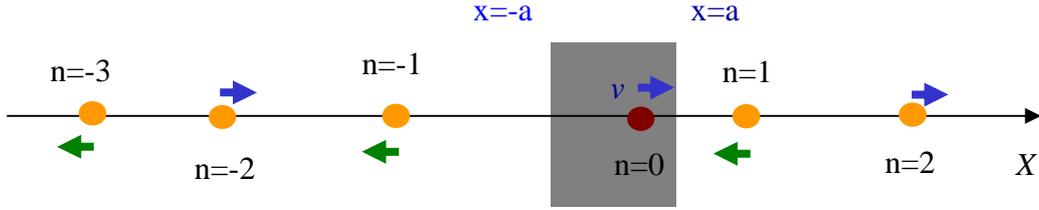


Fig. 4.8 La fuente moviéndose en la dirección X.

Para facilitar su estudio podemos desdoblar esta ecuación en dos sumandos, por un lado estarían tanto la fuente originaria como las imágenes con cardinal par moviéndose con la misma velocidad

$$G_{par} = \frac{1}{(4pa(t-t'))^{3/2}} \sum_{i=-\infty}^{\infty} \exp \left\{ -\frac{(x - [x' + vt' + 4ia])^2}{4a(t-t')} \right\} \quad [4.42]$$

Y por el otra, todas las imágenes con índice impar que se trasladan con velocidad antiparalela a la de la fuente

$$G_{impar} = \frac{1}{(4pa(t-t'))^{3/2}} \sum_{i=-\infty}^{\infty} \exp \left\{ -\frac{(x + x' + vt' - 2[2i+1]a)^2}{4a(t-t')} \right\} \quad [4.43]$$

De manera que la función de Green se expresaría como:

$$G_x = G_{par} + G_{impar} \quad [4.44]$$

De nuevo nos concentraremos en el término central de la serie,

$$G_{par}|_{i=0} = \frac{1}{(4pa(t-t'))^{3/2}} \exp \left\{ -\frac{(x - [x' + vt'])^2}{4a(t-t')} \right\} \quad [4.45]$$

Manteniendo fijo el tiempo de acción de la fuente t' , esta función tiene un máximo en

$$t = t' + \frac{(x - vt')^2}{6a} \quad [4.46]$$

El estudio de la contribución que hace el propagador [4.45] en función del tiempo sobre un punto que situamos delante de la fuente nos indica que, a diferencia de la situación en la que la fuente se trasladaba perpendicularmente a las imágenes, la influencia es mucho mayor que si el punto se situara detrás de la fuente (Fig. 4.9).

La gráfica (Fig. 4.10) representa la evolución temporal de [4.45], fijando la acción de la fuente durante $t' = 1$ s, para un punto que se mueve solidariamente con la fuente ($x = vt$). Para tiempos pequeños la contribución de la función de Green es muy grande pero no infinita (hay que recordar que se debe cumplir $t > t'$), para luego caer abruptamente. Las curvas están trazadas para dos valores del número de Peclet. Hay que destacar que según va aumentando el valor de Pe, según aumenta el dominio de la velocidad de la fuente sobre la conducción, crece la pendiente, en términos de valor absoluto.

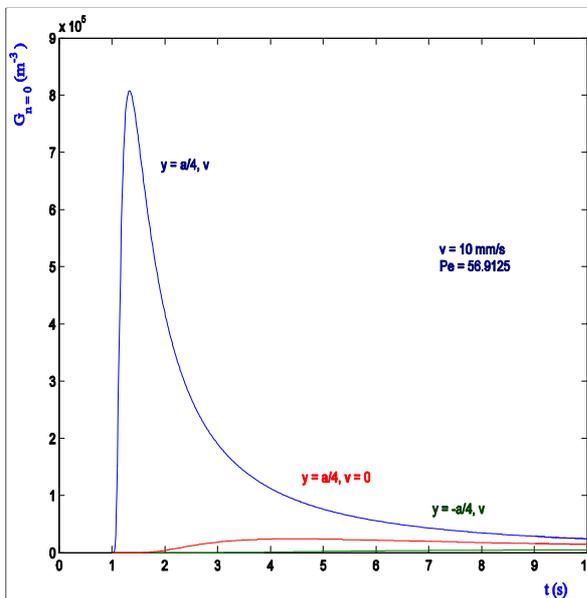


Fig. 4.9 Evolución temporal del término $G(n = 0)$ para un punto delante de la fuente (azul), otro detrás (verde) y cuando la fuente está quieta (rojo)

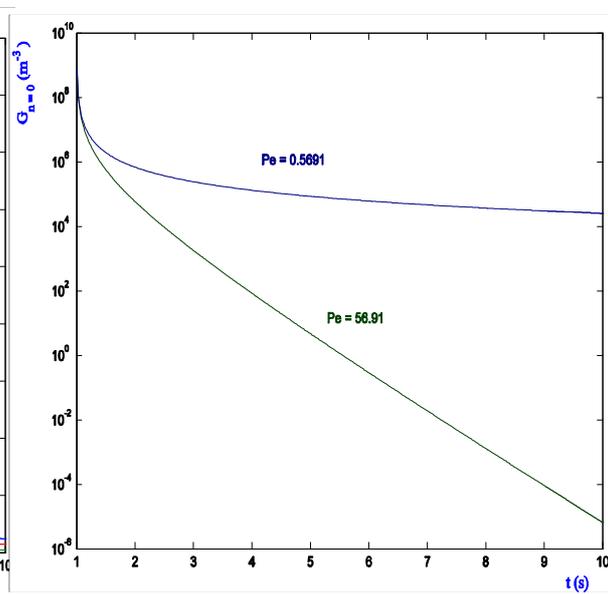


Fig. 4.10 Evolución temporal del término $G(n = 0)$ para dos números de Peclet

4.1.2 Aplicación del método de las imágenes

En este apartado aplicaremos el método de las imágenes al tratamiento de una placa de acero de dimensiones $2a \times 2b \times h$ en dos situaciones:

- Iluminada con un haz rectangular estacionario de dimensiones $2a \times 2b$.
- Iluminada con un modo TEM_{01} * que se mueve, en el plano $z=0$ con velocidad v .

4.1.2.1 Haz rectangular estacionario

La distribución de temperaturas para tiempos mayores que cero, será

$$T(x, y, z, t) = T_0 + \frac{2a}{k} \int_{s', t'} f(\mathbf{r}', t') G(\mathbf{r}, \mathbf{r}', t, t') dx' dy' dt' \quad [4.47]$$

La fuente está descrita por la ecuación,

$$f(\mathbf{r}', t') = \begin{cases} \frac{P_0}{4ab} & |x'| \leq a, |y'| \leq b, z' = 0 \\ 0 & \text{en otro caso} \end{cases} \quad [4.48]$$

Donde se consideró que el centro de la fuente está situado en el origen de coordenadas.

La función de Green es igual a

$$G(\mathbf{r}, \mathbf{r}', t, t') = [4pa(t-t')]^{-3/2} \exp\left\{-\frac{(x-x')^2 + (y-y')^2 + z^2}{4a(t-t')}\right\} \quad [4.49]$$

Entonces, la distribución de temperaturas resultante para un espacio de integración infinito:

$$T(x, y, z, t) = T_0 + \frac{2\mathbf{a}}{\mathbf{k}} \int_0^t \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} f(\mathbf{r}', t') G(\mathbf{r}, \mathbf{r}', t, t') dx' dy' dt' \quad [4.50]$$

Método de las imágenes

Al imponer los límites geométricos haciendo uso del método de las imágenes, la distribución de temperaturas se transforma en:

$$T(\mathbf{r}, t) = T_0 + \frac{2\mathbf{a}}{\mathbf{k}} \sum_{n_x=-\infty}^{\infty} \sum_{n_y=-\infty}^{\infty} \sum_{n_z=-\infty}^{\infty} \int_0^t \int \int f_{im}(\mathbf{r}') G_{im}(\mathbf{r}, \mathbf{r}', t, t') dx' dy' dt' \quad [4.51]$$

siendo

$$f_{im}(\mathbf{r}') = \begin{cases} \frac{P_0}{4ab} & |x' - 2n_x a| \leq a, \quad |y' - 2n_y b| \leq b, \quad z = 2n_z h \\ 0 & \text{en otro caso} \end{cases} \quad [4.52]$$

$$G_{im}(\mathbf{r}, \mathbf{r}', t, t') = [4\mathbf{p}\mathbf{a}(t-t')]^{-3/2} \exp\left\{-\frac{(x-x')^2 + (y-y')^2 + (z-2n_z h)^2}{4\mathbf{a}(t-t')}\right\}$$

Para cada una de las imágenes hay que integrar entre los límites geométricos donde está definida la fuente. La expresión de la temperatura queda:

$$T(x, y, z, t) = T_0 + \frac{1}{2\mathbf{k}} \int_0^{4at} \int_{(2n_y-1)b}^{(2n_y+1)b} \int_{(2n_x-1)a}^{(2n_x+1)a} f_{im} G_{im} dx' dy' du \quad [4.53]$$

La estrategia que vamos emplear con [4.53] consiste en resolver analíticamente las integrales espaciales dejando que la integración temporal sea determinada por métodos numéricos. Resolviendo las dos integrales espaciales, la distribución de temperatura queda,

$$T(\mathbf{r}, t) = T_0 + \frac{P_0}{8ab\mathbf{k}} \frac{1}{4\sqrt{\mathbf{p}}} \sum_{n_x=-\infty}^{\infty} \sum_{n_y=-\infty}^{\infty} \sum_{n_z=-\infty}^{\infty} \int_0^{4at} u^{1/2} L_{im} \exp\left\{-\frac{(z-2n_z h)}{u}\right\} du \quad [4.54]$$

siendo

$$L_{im} = \left[\operatorname{erf} \left\{ \frac{x - (2n_x - 1)a}{\sqrt{u}} \right\} - \operatorname{erf} \left\{ \frac{x - (2n_x + 1)a}{\sqrt{u}} \right\} \right] \times \left[\operatorname{erf} \left\{ \frac{y - (2n_y - 1)b}{\sqrt{u}} \right\} - \operatorname{erf} \left\{ \frac{y - (2n_y + 1)b}{\sqrt{u}} \right\} \right] \quad [4.55]$$

4.1.2.2 Modo TEM₀₁* en movimiento

Partimos otra vez de la ecuación [4.47] para la distribución de temperaturas. Tomando como fuente, de potencia unitaria, un modo TEM₀₁* con centro en $(x'_0, y'_0, 0)$, (Silfvast, 1996)

$$f(\mathbf{r}', t') = 4 \frac{(x' - x'_0)^2 + (y' - y'_0)^2}{\rho w^4} \exp \left\{ -2 \frac{(x' - x'_0)^2 + (y' - y'_0)^2}{w^2} \right\} \quad [4.56]$$

y la función de Green:

$$G(\mathbf{r}, \mathbf{r}', t, t') = [4\rho a (t - t')]^{-3/2} \exp \left\{ -\frac{(x - x')^2 + (y - y')^2 + z^2}{4a (t - t')} \right\} \quad [4.57]$$

Por otro lado, se la fuente se desplaza con un vector de velocidad constante $(v'_x, v'_y, 0)$ sobre el plano $z = 0$ entonces

$$\begin{aligned} x' - x'_0 &\rightarrow x' - (x'_0 + v'_x t') \\ y' - y'_0 &\rightarrow y' - (y'_0 + v'_y t') \\ z' &\rightarrow 0 \\ t' &\rightarrow t' \end{aligned} \quad [4.58]$$

Método de las imágenes

Para imponer las condiciones de contorno debidas a los límites geométricos necesitamos implementar el método de las imágenes. Ahora la expresión de la temperatura se convierte en

$$T(x, y, z, t) = T_0 + \frac{2a}{k} \sum_{n_x=-\infty}^{\infty} \sum_{n_y=-\infty}^{\infty} \sum_{n_z=-\infty}^{\infty} \int_0^t \int \int f_{im}(\mathbf{r}', t') G_{im}(\mathbf{r}, \mathbf{r}', t, t') dx' dy' dt' \quad [4.59]$$

donde la fuente y el propagador toman las expresiones:

$$f_{im}(\mathbf{r}', t') = \begin{cases} 4 \frac{(x' - X'_0)^2 + (y' - Y'_0)^2}{pw^4} e^{-2 \frac{(x' - X'_0)^2 + (y' - Y'_0)^2}{w^2}} & \begin{array}{l} |x' - 2n_x a| \leq a, \\ |y' - 2n_y b| \leq b, \\ z' = 2n_z h \end{array} \\ 0 & \text{en otro caso} \end{cases} \quad [4.60]$$

$$G_{im}(\mathbf{r}, \mathbf{r}', t, t') = [pu]^{-3/2} \exp \left\{ -\frac{(x - x')^2 + (y - y')^2 + Z^2}{u} \right\}$$

con

$$\begin{aligned} X'_0 &= (-1)^{n_x} (x'_0 + v_x t') + 2n_x a \\ Y'_0 &= (-1)^{n_y} (y'_0 + v_y t') + 2n_y b \\ Z &= z - 2n_z h \\ u &= 4a(t - t') \end{aligned} \quad [4.61]$$

El resultado de integrar en las variables x' e y' es:

$$T(x, y, z, t) = T_0 + \frac{1}{2k} \sum_{n_x=-\infty}^{\infty} \sum_{n_y=-\infty}^{\infty} \sum_{n_z=-\infty}^{\infty} \int_0^{4at} F(u) du \quad [4.62]$$

siendo

$$F(u) = \frac{4}{pw^4} [pu]^{-3/2} \exp \left\{ -2 \frac{(x-X'_0)^2 + (y-Y'_0)^2}{w^2 + 2u} - \frac{Z^2}{u} \right\} \times \left\{ \frac{p}{C_1} \left[(C_2 - X'_0)^2 + (C_3 - Y'_0)^2 + \frac{1}{C_1} \right] L_x L_y - \frac{1}{2} \sqrt{\frac{p}{C_1}} [L_x M_y + L_y M_x] \right\} \quad [4.63]$$

con

$$\begin{aligned} C_1 &= \frac{w^2 + 2u}{w^2 u} \\ C_2 &= \frac{w^2 x + 2uX'_0}{w^2 + 2u} \\ C_3 &= \frac{w^2 y + 2uY'_0}{w^2 + 2u} \\ L_x &= \frac{1}{2} \left\{ \operatorname{erf} \left(\sqrt{C_1} [(2n_x + 1)a - C_2] \right) - \operatorname{erf} \left(\sqrt{C_1} [(2n_x - 1)a - C_2] \right) \right\} \\ L_y &= \frac{1}{2} \left\{ \operatorname{erf} \left(\sqrt{C_1} [(2n_y + 1)b - C_3] \right) - \operatorname{erf} \left(\sqrt{C_1} [(2n_y - 1)b - C_3] \right) \right\} \\ M_x &= \left((2n_x + 1)a + C_2 - 2X'_0 \right) e^{-C_1((2n_x+1)a-C_2)^2} + \\ &\quad + \left((2n_x - 1)a - C_2 + 2X'_0 \right) e^{-C_1((2n_x-1)a+C_2)^2} \\ M_y &= \left((2n_y + 1)b + C_3 - 2Y'_0 \right) e^{-C_1((2n_y+1)b-C_3)^2} + \\ &\quad + \left((2n_y - 1)b - C_3 + 2Y'_0 \right) e^{-C_1((2n_y-1)b+C_3)^2} \end{aligned} \quad [4.64]$$

4.1.3 Análisis adimensional

Una herramienta complementaria al método de las imágenes es la utilización de números adimensionales para resolver [4.47]. Las ventajas que esperamos son, por un lado, la generalización de la búsqueda de los parámetros, y por el otra, una mayor rapidez en los cálculos. Comprobemos esto.

La distribución de temperaturas para cualquier punto generada por un haz láser TEM₀₁* sobre una pieza lo suficientemente grande como para depreciar los efectos de borde y que se desplaza con velocidad constante en la dirección OX̄:

$$T(\mathbf{r}, t) = T_0 + \frac{P_0}{2\mathbf{k}} \int_0^{4\mathbf{a}t} F(u) du \quad [4.65]$$

siendo $P_0 = \text{cte}$ la potencia, $u = 4\mathbf{a}(t - t')$, y

$$F(u) = \frac{4 \left\{ \mathbf{w}^2 \left[\left(x + \frac{vu}{4\mathbf{a}} \right)^2 + y^2 \right] + u \left[\mathbf{w}^2 + 2u \right] \right\}}{\mathbf{p} \sqrt{\mathbf{p}u} (\mathbf{w}^2 + 2u)^3} \times \exp \left\{ - \frac{2 \left[\left(x + \frac{vu}{4\mathbf{a}} \right)^2 + y^2 \right]}{\mathbf{w}^2 + 2u} - \frac{z^2}{u} \right\} \quad [4.66]$$

Las variables x e y son las coordenadas cartesianas de la distribución, \mathbf{w} representa la anchura de la distribución y \mathbf{a} la difusividad térmica. Tomando como unidad de longitud $r_0 = \mathbf{w}/\sqrt{2}$ se pueden definir un conjunto de variables adimensionales:

$$\begin{aligned} X &= \frac{x}{r_0}; \quad Y = \frac{y}{r_0}; \quad Z = \frac{z}{r_0} \\ \mathbf{q} &= \frac{T - T_0}{P_0/2\mathbf{p}\mathbf{k}r_0} \\ Pe &= \frac{vr_0}{2\mathbf{a}} \\ U &= \frac{u}{r_0^2}; \quad U_0 = \frac{4\mathbf{a}t}{r_0^2} \end{aligned} \quad [4.67]$$

Con lo que sustituyendo en [4.65] y en [4.66]

$$\mathbf{q}(X, Y, Z, U_0) = \int_0^{U_0} F(U) dU \quad [4.68]$$

$$F(U) = \frac{\left(X + \frac{UPe}{2}\right)^2 + Y^2 + U(U+1)}{\sqrt{pU}(U+1)^3} \times \exp\left\{-\frac{\left(X + \frac{UPe}{2}\right)^2 + Y^2}{1+U} - \frac{Z^2}{U}\right\} \quad [4.69]$$

Una vez hecha la integración numérica de [4.68] la temperatura adimensional q dependerá únicamente del tiempo U_0 , de la posición (X, Y, Z) y del número de Peclet.

Para determinar el valor máximo de la temperatura tomamos un intervalo de integración lo suficientemente amplio como para que se alcance el estado estacionario. Conociendo que este máximo se alcanza en la línea $(X, 0, 0)$ que es recorrida por el centro del haz, la temperatura [4.68] únicamente tendrá dependencias con la coordenada adimensional X (referida al centro del haz) y con el número de Peclet. En estas circunstancias (Tian, 1994) se pueden construir dos curvas que relacionen Pe con la máxima temperatura (Fig. 4.11) y con la posición donde se alcanza ésta (Fig. 4.12). Estas gráficas serán universales, esto es, independientes de las características particulares de cada proceso.

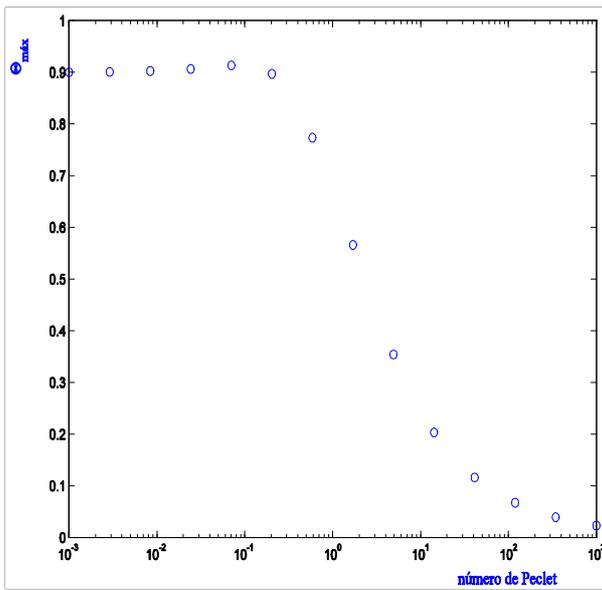


Fig. 4.11 Temperatura máxima adimensional frente al número de Peclet para un haz TEM_{01} *

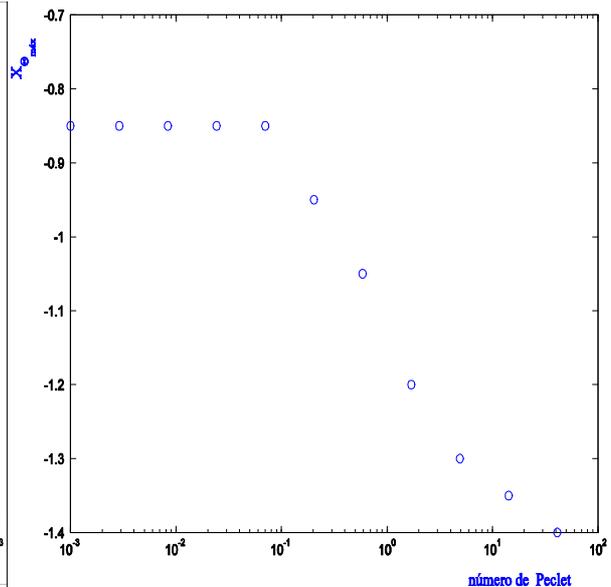


Fig. 4.12 Posición de la temperatura máxima en la dirección X frente al número de Peclet.

Para establecer los parámetros de un proceso concreto hay que tomar algunas decisiones previas:

- La potencia elegida debe dejar margen para subirla si así fuera oportuno (la máxima potencia suministrada por el resonador RS 2000 M es de 2000 W).
- La anchura del haz debe permitir templar una región amplia.
- Las propiedades del material se deben tomar para una temperatura que supere ampliamente a T_{Ac3} .

Con estas consideraciones, interpolando sobre las curvas (Pe, \mathbf{q}_{\max}) y $(Pe, X_{\mathbf{q}_{\max}})$ se saca la temperatura máxima y su coordenada X para un valor deseado de la velocidad. Con el mismo valor de Pe interpolando la temperatura (ec. [4.68]) para distintos valores de $(X, Y, 0)$ y de $(X, 0, Z)$, se pueden encontrar los valores máximos de Y y Z , respectivamente, para los que se alcanza T_{Ac3} . Sólo quedaría reponer las unidades. Este método se puede generalizar para obtener, en poco tiempo, mapas de temperaturas y la profundidad de las isotermas.

La selección de los parámetros del proceso debe tener en consideración las oscilaciones de sus valores durante el tratamiento en el laboratorio. Así, experimentalmente, la potencia está definida con un error del 1%, la velocidad con un 3.01% y un 0.15% para la altura en la que se mantiene el cabezal. Como el ángulo f de dispersión del haz permanece constante, el error con que está definida la anchura del modo TEM_{01*} también queda establecido en un 0.15%.

$$w = \frac{h}{\tan f} \Rightarrow \frac{\Delta w}{w} = \frac{\Delta h}{h} \quad [4.70]$$

A este valor habrá que sumarle la falta de paralelismo entre la superficie de la probeta y el plano transversal al haz, así el error total de la anchura del modo es de 5.4%.

4. Desarrollo de un modelo de tratamiento térmico con láser

El conocimiento de la influencia de pequeñas variaciones en estas variables sobre la temperatura máxima facilita su elección. Se puede demostrar que la máxima temperatura que se alcanza sobre un material, la correspondiente al estado estacionario, es una función de:

$$T_{\max} = \frac{\sqrt{2}}{2p} \frac{P_0}{kw} f \left(\frac{\sqrt{2}}{4} \frac{wvrc}{k} \right) \quad [4.71]$$

siendo v la velocidad relativa entre el haz y el material y P_0 la potencia depositada. La gráfica 4.13 representa el efecto que tienen en el error relativo de la temperatura máxima (en tanto por uno) pequeñas variaciones tanto en los parámetros del proceso como en las propiedades del material. Se observa que una pequeña alteración en la anchura del haz, la potencia o el coeficiente de absorción modifica sensiblemente el valor de la temperatura. Por el contrario para que se haga sentir la influencia de la velocidad relativa o de las propiedades térmicas del material sobre la temperatura máxima hay que ir a grandes variaciones en estas magnitudes.

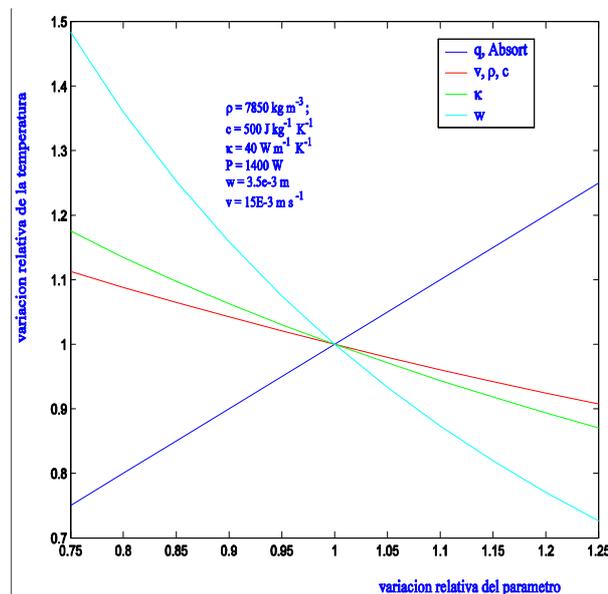


Fig. 4.13 Oscilación relativa de la temperatura máxima con pequeñas variaciones de los parámetros.

Bibliografía

- Álvarez, C. et al. (2001); *Real time control and monitoring of laser hardening process: applications to cylindrical workpieces*; Laser Assisted net Shape Engineering 3. Proceeding of the LANE 2001. Surface & Heat Treatment. 223-234.
- von Allmen, M., A. Blatter (1995); *Laser-beam interactions with materials 2nd Ed.*; Springer.
- Bailer-Jones, C.A.L., H.K.D.H. Bhadeshia, D.J.C. MacKay (1999); *Gaussian process modeling of austenite formation in steel*; Materials Science Technology, Vol. 15, pp. 287-294.
- Carslaw, H.S., J.C. Jaeger (1992); *Conduction of heat in solids 2nd Ed.*; Oxford Science Publications.
- Dowden, J.M. (2001); *The mathematics of thermal modelling*; Chapman & Hall/CRC
- Duley, W.W. (1983); *Laser processing and analysis of materials*; Plenum.
- Festa, R., O. Manca, V. Naso (1990); *Simplified thermal models in laser and electron beam surface hardening*; J. Heat Mass Transfer, Vol. 33. No. 11, pp. 2511-2518.
- Galantucci, L.M., L. Tricarico (1990); *Un Modello statistico per la previsione dei profili di durezza in acciai da bonifica e da tempra superficiale sottoposti a saldatura ed a trattamento termico*; La Metallurgia Italiana, Vol. 82, No. 10, pp. 969-979.
- Gu, B.W., et al. (1994); *Three dimensional numerical model for laser transformation hardening of metals*; Mat. Sci. Tech., Vol 10, pp. 425-430.
- Kou, S., D.K. Sun, Y.P. Le (1983); *A Fundamentals study of laser transformation hardening*; Metallurgical Transactions A, Vol. 14^a, pp. 643-653.
- Marya, M, S.K. Marya (1997); *Prediction & optimization of laser transformation hardening*; Laser Assisted Net Shape Engineering Proceedings of the LANE'97; Eds. M. Geiger, F. Vollertsen, Meisenbach Bamberg 1997.
- Ohmura, E., K. Inoue (1991); *Theoretical analysis of laser transformation hardening process of hypoeutectoid steel based on kinetics*; JSME International Journal, Vol. 34, No. 4, pp. 421-429.
- Rajadhyaksha, S.M., P. Michaleris (2000); *Optimization of thermal process using an Eulerian formulation and application in laser surface hardening*; Int. J. Numer. Meth. Engng. 47:1807-1823.
- Silfvast, W.T. (1996); *Laser Fundamentals*; Cambridge University Press.

Tian, X., F.E. Kennedy (1994); *Maximum and average flash temperatures in sliding contacts*; Journal of Tribology, January, Vol. 116, pp. 167-174.

Weinberg, H.F. (1992); *Ecuaciones diferenciales en derivadas parciales*; Reverté

Weisstein, E.W. (1999); *CRC concise encyclopaedia of mathematics*; Chapman & Hall / CRC.

Zimba, J., et al. (1999); *Three-dimensional diffusion model for austenitisation of ferritic spheroidal graphite irons*; *Materials Science and Technology*, Vol 15, pp. 1024-1030.

Zubair, S.M., M.A. Chaudhry (1996); *Heat Conduction in a Semi-Infinite Solid Due to Time-Dependent Laser Source*; *Int. J. Heat Mass Transfer*. Vol. 39 No. 14 pp. 3067-3074.

4.2 Modelo de elementos finitos

Para la modelización con el método de los elementos finitos se escribió un código en Fortran 77 (*laser*) que sirve de enlace entre el usuario y ANSYSTM. Este programa desarrollado por el autor facilita la simulación de los tratamientos térmicos al construir, a partir de unos pocos datos, un modelo numérico (malla y cargas). Entre sus características están:

- Permite elegir entre un proceso estacionario o uno transitorio
- Da la posibilidad de trabajar con tres tipos de geometrías (ortoédrica, un arco de cilindro o un cilindro completo) y de seleccionar las dimensiones y distribución de la malla.
- Admite iluminar la superficie de la probeta con un modo TEM₀₀ o TEM_{01*}, con un haz rectangular o prescindir de la fuente.
- Permite reducir el tamaño del archivo de salida eligiendo los nodos de los que se guardará su historia térmica.

El esquema de su funcionamiento es como sigue (*Fig. 4.14*).

- 1° El programa lee de dos archivos o más¹ un conjunto de parámetros del proceso, dimensiones de la discretización de la malla tanto espacial como temporal y propiedades del material.
- 2° La ejecución del código da como resultado una asamblea de datos organizados en ficheros y escritos en APDL (ANSYSTM Parametric Design Language).
- 3° Ejecución de ANSYSTM.

¹ Ver el Anexo I

4º Filtrado del archivo de salida.

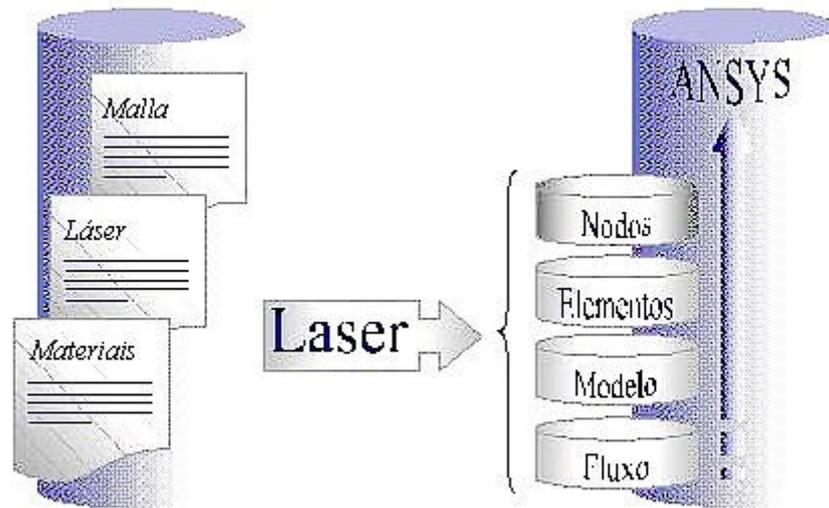


Fig. 4.14 El programa laser, después de leer los datos de entrada, devuelve un conjunto de archivos escritos en APDL.

4.2.1 Mallado

El código *laser* genera únicamente mallas compuestas de elementos definidos con 8 nodos distribuidos sobre los vértices de un ortoédro. La única variante que admite es un elemento cóncavo, también de 8 nodos, para crear geometrías con curvatura. Esta regularidad en la red permite encontrar fácilmente relaciones entre el tamaño de la malla y el error que introduce el modelo.

Uno de los puntos fuertes de este código está en la rapidez en construir la red y en las múltiples posibilidades a la hora de distribuirla. Por ejemplo, la superficie se puede reticular con nueve discretizaciones diferentes y el espesor admite dos redes con distinta dimensión de mallado.

4.2.2 Geometrías

Para modelar se eligieron formas que se consideran representativas: un paralelepípedo con ángulos rectos para la simulación de placas y un cilindro hueco. También cabe la posibilidad de modelar un arco del cilindro hueco, lo que puede permitir ahorrar un

número considerable de nodos. Para hacer uso de otras geometrías se pagaría un precio en forma de una mayor complejidad del algoritmo de mallado.

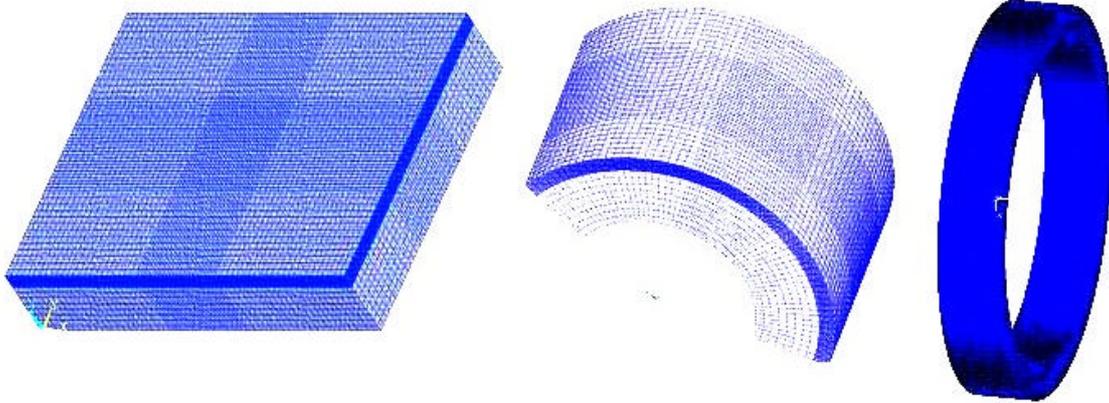


Fig. 4.15 El programa laser trabaja con tres geometrías: ortoédrica, un arco o un cilindro hueco.

4.2.3 Discretización del haz

Como ya mencionamos el programa *laser* permite simular tres tipos de haz. A continuación se describirá como se discretiza uno de ellos, el que corresponde al láser de CO₂ RS 2000 SM del grupo LAIL de la UDC.

La estructura transversal del haz que emite en el modo TEM_{01*} tiene por ecuación:

$$TEM_{01^*} = E_0 \left(\frac{\sqrt{2[(x-x_c)^2 + (y-y_c)^2]}}{w} \right) \exp \left\{ -\frac{(x-x_c)^2 + (y-y_c)^2}{w^2} \right\} \quad [4.72]$$

donde E_0 representa la amplitud del campo eléctrico. Si P_0 es la potencia, y su distribución tiene la forma

$$dP = P_0 \frac{4}{pw^2} \frac{[(x-x_c)^2 + (y-y_c)^2]}{w^2} \exp \left\{ -2 \frac{(x-x_c)^2 + (y-y_c)^2}{w^2} \right\} dx dy \quad [4.73]$$

4. Desarrollo de un modelo de tratamiento térmico con láser

La discretización de esta expresión se hace integrando en un rectángulo de lados d_x y d_y ,

$$\Delta P = \int_x^{x+d_x} \int_y^{y+d_y} dP \, dx \, dy = P_0 \frac{1}{4} \left[AB + \frac{1}{\sqrt{p}} (CB + AD) \right] \quad [4.74]$$

donde los coeficientes A , B , C , y D tienen la forma:

$$\begin{aligned} A &= \operatorname{erf} \left(\frac{x + d_x - x_c}{w/\sqrt{2}} \right) - \operatorname{erf} \left(\frac{x - x_c}{w/\sqrt{2}} \right) \\ B &= \operatorname{erf} \left(\frac{y + d_y - y_c}{w/\sqrt{2}} \right) - \operatorname{erf} \left(\frac{y - y_c}{w/\sqrt{2}} \right) \\ C &= \frac{x - x_c}{w/\sqrt{2}} \exp \left\{ - \left(\frac{x - x_c}{w/\sqrt{2}} \right)^2 \right\} - \frac{x + d_x - x_c}{w/\sqrt{2}} \exp \left\{ - \left(\frac{x + d_x - x_c}{w/\sqrt{2}} \right)^2 \right\} \\ D &= \frac{y - y_c}{w/\sqrt{2}} \exp \left\{ - \left(\frac{y - y_c}{w/\sqrt{2}} \right)^2 \right\} - \frac{y + d_y - y_c}{w/\sqrt{2}} \exp \left\{ - \left(\frac{y + d_y - y_c}{w/\sqrt{2}} \right)^2 \right\} \end{aligned} \quad [4.75]$$

Si el haz tiene un desplazamiento respecto de la malla este cálculo debe repetirse para cada paso de tiempo. Una representación gráfica de este modo se ve en:

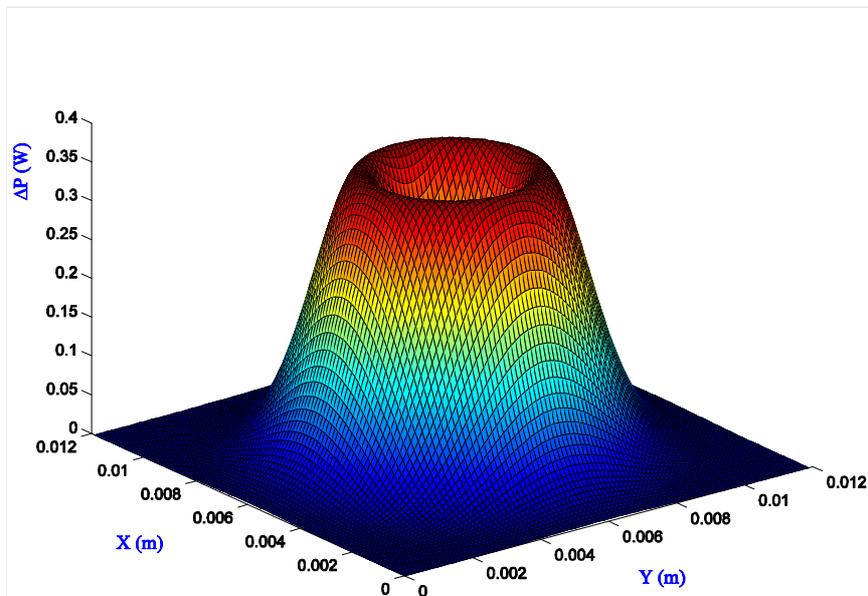


Fig. 4.16 Distribución transversal de la potencia del modo TEM_{01}^* .

Sobre una geometría cilíndrica

Para aplicar la distribución de potencia del haz sobre la superficie exterior de un cilindro o un arco primeramente hubo que transformar las coordenadas cartesianas en cilíndricas. Si r_{ext} representa el radio exterior del cilindro y n la longitud del arco en unidades del tamaño de la malla:

$$\begin{aligned} x &\rightarrow r_{ext} \sin na \\ y &\rightarrow y \\ z &\rightarrow r_{ext} \cos na \end{aligned} \quad [4.76]$$

El ángulo a está relacionado con el tamaño de la red Δx mediante:

$$a = 2 \arcsin \left\{ \frac{\Delta x}{2r_{ext}} \right\} \quad [4.77]$$

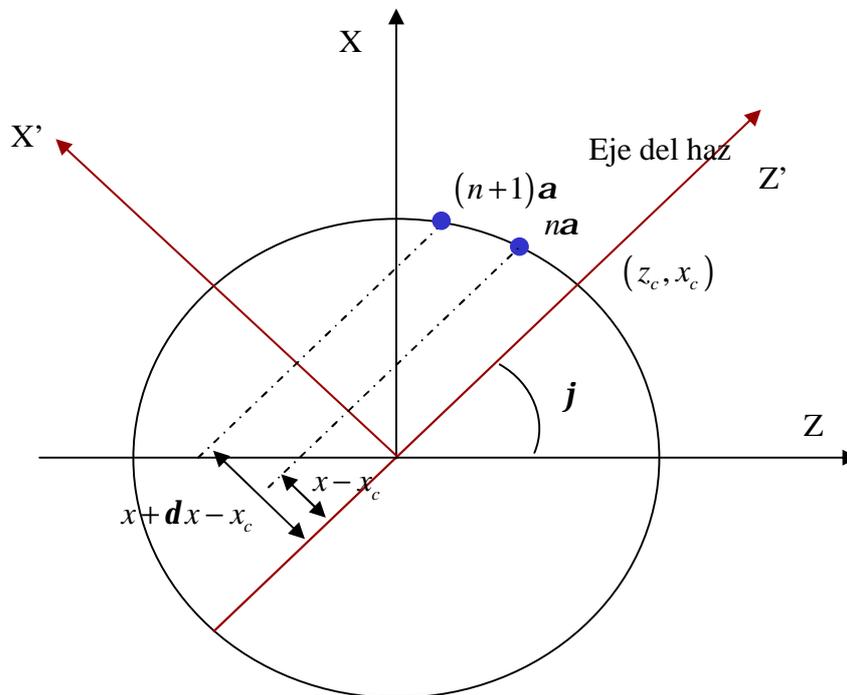


Fig. 4.17 Esquema de la rotación del eje de simetría Z' del haz.

Con posterioridad se orientó mediante un giro el sistema de referencia local del haz,

$$\begin{pmatrix} x' \\ y' \\ z' \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \cos \mathbf{j} & 0 & -\sin \mathbf{j} \\ 0 & 1 & 0 \\ \sin \mathbf{j} & 0 & \cos \mathbf{j} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x \\ y \\ z \end{pmatrix} \quad [4.78]$$

donde \mathbf{j} mide la posición angular del centro del haz como muestra la figura 4.17.

Con estas reglas, para obtener ΔP en el intervalo de integración deseado, basta aplicar las siguientes transformaciones sobre [4.75]:

$$\begin{aligned} x + \mathbf{d}_x - x_c &\rightarrow r_{ext} \sin[(n+1)\mathbf{a}] \cos \mathbf{j} - r_{ext} \cos[(n+1)\mathbf{a}] \sin \mathbf{j} \\ x - x_c &\rightarrow r_{ext} \sin[n\mathbf{a}] \cos \mathbf{j} - r_{ext} \cos[n\mathbf{a}] \sin \mathbf{j} \\ x_c &\rightarrow r_{ext} \sin \mathbf{j} \end{aligned} \quad [4.79]$$

Siendo n un número entero mayor o igual que cero.

4.2.4 Errores introducidos con la discretización

El uso del método de los elementos finitos no garantiza la exactitud de los resultados. El estudio de la malla nos permitirá, por un lado su refinamiento, y por el otro, mejorar la exactitud de la solución. Durante las simulaciones habrá que adoptar decisiones de compromiso entre los errores de los resultados y el consumo de tiempo-memoria para la ejecución del código (*Saavedra, 2000*).

Mientras J.C. Rozzi y S. Kou evalúan el código comparando los resultados con las soluciones exactas de la ecuación del calor para medios infinitos o semiinfinitos, otros autores, J.C. Álvarez, E. Saavedra y A. Yáñez, emplean como contraste las soluciones, también exactas, aportadas por el método de las imágenes (*Álvarez, 2001*) (*Kou, 1983*) (*Rozzi, 1998*) (*Saavedra, 2000*) (*Yáñez, 2001*).

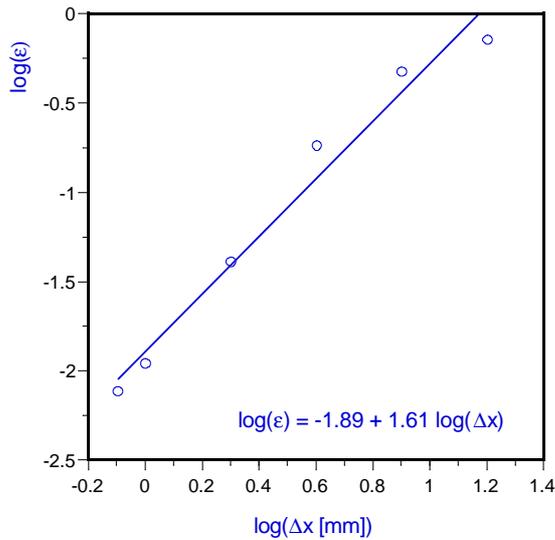
En la resolución de un modelo de elementos finitos aparecen múltiples dependencias que limitan la exactitud del método. Para estimar algunos de estos errores, los que se refieren a la dimensión de la malla, tanto espacial como temporal, compararemos los resultados con la solución analítica exacta alcanzada con el método de las imágenes.

Influencia de la discretización espacial

Ya fue tratada la relación existente entre el error que aporta el algoritmo de los elementos finitos y el tamaño de la red, ecuación [3.55] (*Bathe, 1996*). Para demostrar esta afinidad se compararon la solución analítica y la numérica, en el siguiente experimento:

- La fuente de 1000 W emitió durante 1 segundo, cubriendo una superficie de $32 \times 32 \text{ mm}^2$.
- La probeta de un material con sus propiedades térmicas constantes ($\rho = 7850 \text{ kg m}^{-3}$, $c = 460.8 \text{ J kg}^{-1} \text{ K}^{-1}$, $k = 24.9 \text{ W m}^{-1} \text{ K}^{-1}$), de dimensiones $32 \times 32 \times 16 \text{ mm}^3$, partía de una temperatura inicial de 300 K.
- La geometría de la pieza, ortoédrica, se cubrió homogéneamente con elementos cúbicos.
- El tamaño del paso temporal fue de 0.0144 s lo que corresponde a un número de Fourier igual a $Fo = 10$ [3.72] para la malla más fina.
- Se obtuvo el error de la temperatura comparando con el método de las imágenes transcurrido un segundo a partir del encendido de la fuente en el centro de la cara iluminada.

El análisis de los resultados (*Fig. 4.18*) nos permite verificar la relación ya conocida (*Bathe, 1996*): el uso de una malla más densa consigue disminuir el error de la solución numérica, siendo el orden de convergencia de 1.61. Evidentemente este aumento en el número de elementos repercutirá tanto en el consumo de memoria, como en el de tiempo de ejecución del código.



Nodos	Δx [mm]	ΔT [K]
18	16	83.247
75	8	55.237
405	4	21.287
2601	2	4.757
18513	1	1.277
35301	0.8	0.887

Fig. 4.18 Error relativo de la temperatura ϵ frente al tamaño de la malla Δx . El orden de converxencia es de 1.61.

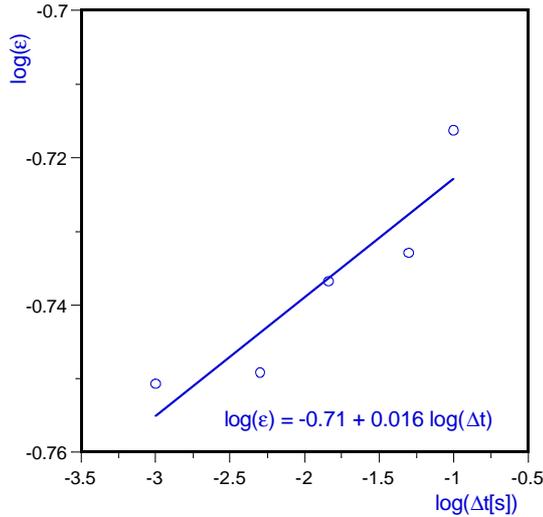
Influencia de la discretización temporal

Este apartado tiene por objeto sacar a la luz la influencia de la discretización temporal en la exactitud de la solución. Continuando con la misma fuente y probeta que en el anterior experimento, pero esta vez establecemos un valor fijo para el tamaño de las retículas (4 mm de arista).

Al modificar la extensión del paso de tiempo, disminuyéndolo, se observa que aumenta la precisión del resultado, siendo el orden de convergencia de 0.016 (Fig. 4.19). Sin embargo, al igual que sucedía en el análisis anterior, se paga un precio en forma de gasto de CPU. Es importante destacar que por debajo de 0.005 s apenas se consigue reducir el error.

Influencia de una malla anisótropa

En todas las simulaciones de procesos con láser la incidencia del haz define una dirección privilegiada, (el eje z en nuestros experimentos). Esta singularidad justifica un estudio más detallado del efecto que producen sobre el error las variaciones del tamaño de la red, únicamente en esa orientación.



Pasos	Fo	Δt [s]	ΔT [K]
10	23	0.1	22.317
20	46	0.05	21.477
69	161	0.0144	21.287
200	464	0.005	20.687
1000	2320	0.001	20.617

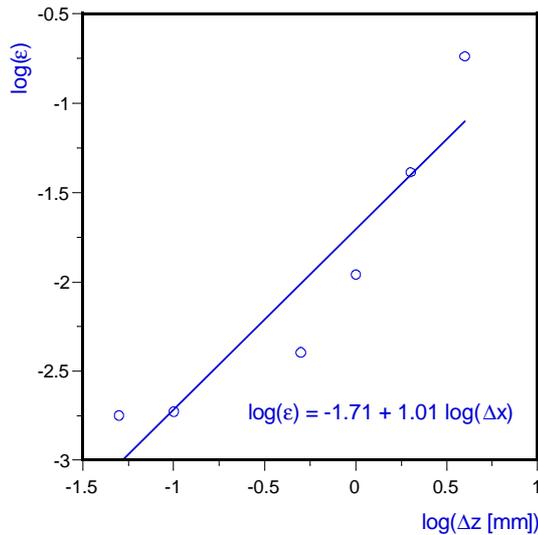
Fig. 4.18 Error relativo de la temperatura ϵ frente al tamaño del paso temporal Δt . El orden de convergencia es de 0.016

Autores como J.K. Bathe y C. Johnson en sus trabajos deducen la existencia de una conexión entre el error absoluto de la solución nodal y la relación de aspecto, magnitud ya definida en [3.56]. Así el error absoluto de la temperatura ΔT , según estos autores, es proporcional al tamaño de los elementos h y a la ya mencionada relación de aspecto r_a (Bathe, 1996) (Johnson, 1978).

$$\Delta T \propto r_a h^k \quad [4.80]$$

Comprobemos esta dependencia. Continuando con las mismas condiciones experimentales del primer estudio, con excepción, claro está, en lo que se refiere al tamaño de la red, distinguiremos dos posibilidades:

- Variación de las dimensiones en la dirección z . Manteniendo fijas las dimensiones de la malla superficial $\Delta x = \Delta y = 4$ mm se varía el espaciado en z entre 4 y 0.05 mm. La comparación entre las predicciones teóricas y los resultados numéricos muestran que es posible, partiendo de una malla gruesa, mejorar la calidad de la solución numérica disminuyendo únicamente la dimensión z de los elementos. Para este tipo de malla el orden de convergencia es de 1.01 (Fig. 4.20).



Nº nodos	$\Delta z \text{ [mm]}$	$\Delta T \text{ [K]}$
405	4	21.287
729	2	4.754
1377	1	1.2770
2673	0.5	0.4670
13041	0.1	0.2170
26001	0.05	0.2070

Fig. 4.20 Error relativo de la temperatura frente a la dimensión en z ($\Delta x = \Delta y = 4 \text{ mm}$). El orden de convergencia es de 1.01

En la misma gráfica 4.19 se observa que a partir de valores de tamaño de malla de 0.1 mm se alcanza una saturación en el valor del error relativo lo que indica que superando este límite únicamente conseguiremos disminuir la incertidumbre aumentando el consumo de tiempo-memoria de la CPU.

- Alteración en las direcciones perpendiculares a z . Manteniendo fijo el valor $\Delta z = 4 \text{ mm}$ se variaron las dimensiones superficiales $\Delta x = \Delta y$ entre 4 y 0.5 mm. Como resultado de nuestras simulaciones se concluye que la variación del tamaño de la retícula en las orientaciones transversales a la propagación del haz no tiene efecto alguno sobre la precisión con que se obtiene la temperatura, como cabría esperar para una fuente uniforme (Fig. 4.21).

La comparación entre los dos análisis nos permite afirmar que aunque en los dos estudios los elementos presentan anisotropías, en el segundo caso no existe subordinación entre la relación de aspecto y el error absoluto de la temperatura.

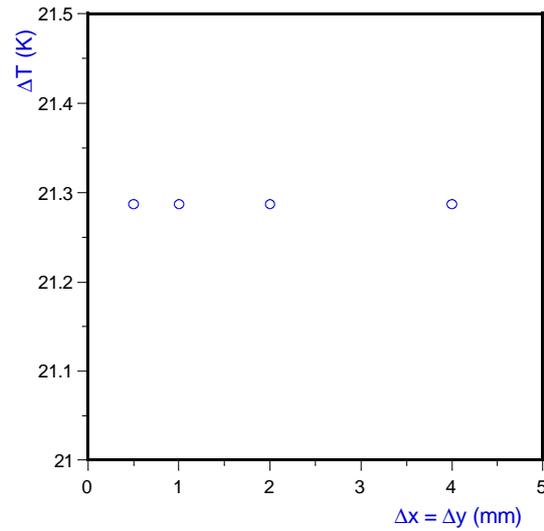


Fig. 4.21 Erro absoluto da temperatura ΔT , fronte ao tamaño da malla superficial ($\Delta z = 4$ mm).

Influencia del espaciado variable en mallas mixtas

Una posibilidad de economizar CPU consiste en el empleo de una malla compuesta de celdas de distintos tamaños (*Fig. 4.22*). Esta red estaría distribuida de manera que la densidad más alta de elementos se situaría inmediatamente debajo de la superficie iluminada por el láser, mientras que la zona más apartada se ocuparía con los retículos de mayor tamaño. Se pretende así aportar más exactitud allí donde se espera un mayor gradiente de temperatura y minimizar el número de elementos en la zona distante. Este modelo de mallado guarda, en sus pretensiones, ciertas similitudes con el mallado adaptativo, pero a diferencia de éste, las dimensiones de los elementos permanecen fijas durante la simulación.

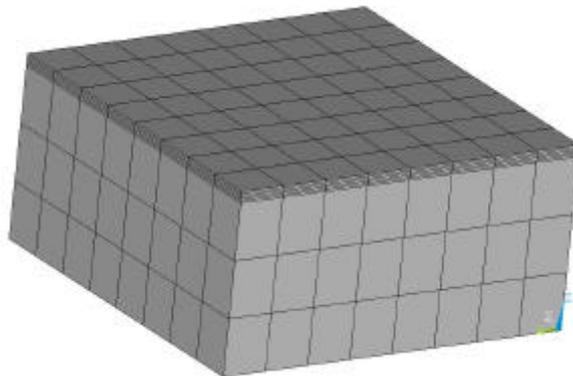


Fig. 4.22 Ejemplo de malla mixta. La mayor densidad de elementos está próxima a la superficie.

4. Desarrollo de un modelo de tratamiento térmico con láser

Siguiendo con las condiciones iniciales del experimento, fijando la malla superficial en 4 mm, analizaremos dos situaciones:

- Variación de la malla próxima a la superficie. Conservando invariable el tamaño de la red distante se observa que el error relativo de la temperatura es sensible a la dimensión, en la dirección z, de la malla próxima a la superficie. En (Fig. 4.23) se representan dos elecciones del tamaño de la malla distante (1 y 4 mm) siendo los órdenes de convergencia de 0.45 y 0.75 respectivamente, lo que demuestra que este efecto es mayor para una malla lejana gruesa.
- Modificación de la red distante a la superficie. Si en esta ocasión queda fija la malla próxima en 1 mm, se puede comprobar en la figura (Fig. 4.24) que la mejora en la precisión de la temperatura disminuye respecto a los anteriores estudios, (la pendiente de la recta es 0.15).

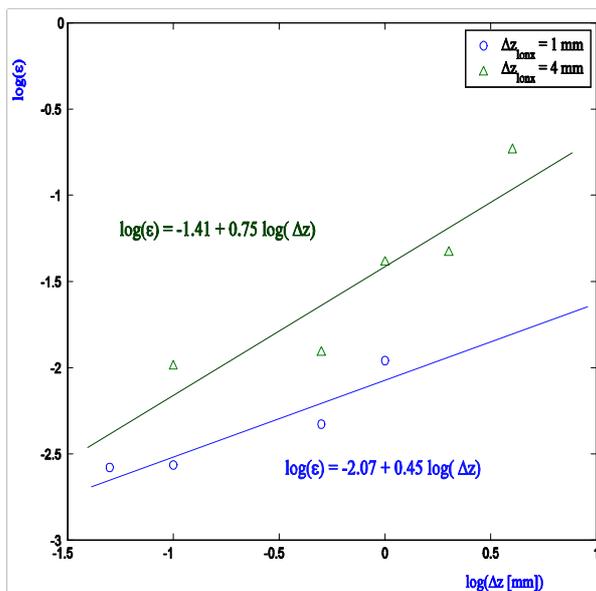


Fig. 4.23 Error relativo da temperatura, frente al tamaño de la red próxima a la superficie. Los órdenes de convergencia son de 0.45 y 0.75

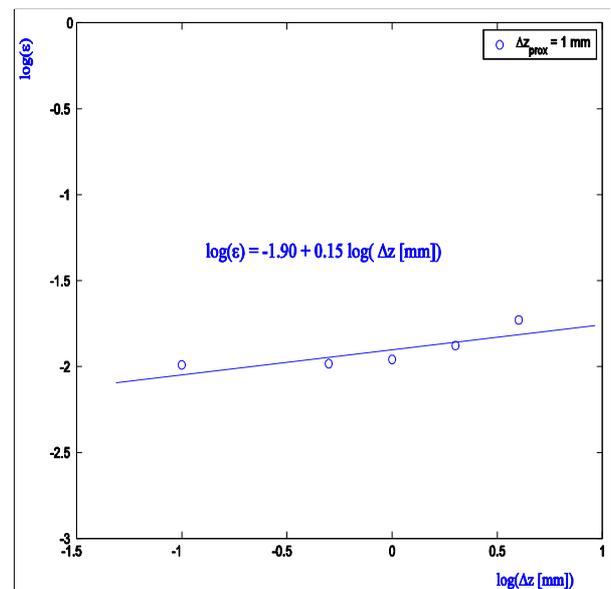


Fig. 4.24 Error relativo de la temperatura, frente al tamaño en z, de la malla distante. El orden de convergencia es de 0.15

La comparación entre los dos análisis nos permite afirmar que aunque en los dos estudios los elementos presentan anisotropías, en el segundo caso no existe subordinación entre la relación de aspecto y el error absoluto de la temperatura.

Influencia del mallado adaptativo

Una forma de minimizar el número de elementos empleados en la construcción de un modelo de elementos finitos consiste en mallar más densamente allí donde se necesite más precisión.

En las mismas condiciones que en los anteriores apartados se reticuló una geometría ortoédrica con una malla cadrada de 4 milímetro de arista. Como malla adaptativa se emplearon diez celdas de 0.2 mm en la dirección del eje Z (paralelo al haz) y para el resto se emplearon elementos de 2 mm de altura. Esta región más densamente discretizada fue desplazándose en Z, desde las proximidades de la superficie hasta los 6 mm de profundidad.

En la siguiente tabla se representan los resultados de las simulaciones. En las columnas que van desde la segunda a la séptima están compiladas las temperaturas alcanzadas desde la superficie hasta los 6 mm de profundidad en seis experimentos. En la última columna se describe la solución teórica a distintas profundidades.

z (mm)	T₁ (K)	T₂ (K)	T₃ (K)	T₄ (K)	T₅ (K)	T_{teór.} (K)
0.0	413.33	412.92	411.39	411.10	411.07	416.10
2.0	351.19	352.29	350.92	350.48	350.44	354.14
4.0	319.89	319.12	320.39	319.61	319.47	320.85
6.0	306.57	306.17	306.14	306.89	306.50	306.50
8.0	301.89	301.73	301.70	301.72	302.03	301.61
10.0	300.48	300.43	300.43	300.42	300.51	300.31

Con fondo gris agrupamos las temperaturas que corresponden a la región más densamente mallada. Por ejemplo, en el experimento T₁ los dos primeros milímetro (con fondo gris) está más densamente mallado que los restantes. En el segundo es la región comprendida entre 2 y 4 mm la que concentra más elementos.

El análisis horizontal de los datos (Fig. 4.25) nos muestra que, el error relativo de la temperatura se hace menor según la región más densamente mallada se acerca a la zona de mayor gradiente.

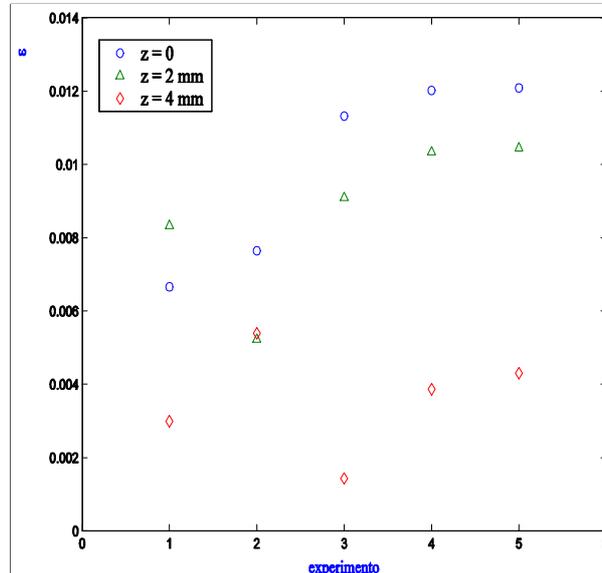


Fig. 4.25 Error relativo de la temperatura a distintas profundidades en 5 experimentos. El menor error aparece en la región más densamente mallada.

Malla mixta formada por cubos y trapecios

Una estructura que permite ahorrar un gran número de nodos consiste en mezclar elementos cúbicos con otros trapezoidales a modo de transición hacia otras celdas, también cúbicas, de mayores dimensiones (Galantucci, 1997). Este tipo de malla permitiría la conversión de 9 cubos (cada uno de ellos de lado D) en un único retículo de arista 3D incorporando dos transiciones alternas, primeramente en una dirección y posteriormente en la perpendicular (Fig. 4.26).

Es complejo, como vinimos haciendo en este apartado, encontrar una dependencia entre el error relativo de la temperatura y una variable geométrica de la malla. Esta dificultad estriba en la presencia varias dimensiones en el reticulado de la probeta. Como una alternativa que nos permitiera el estudio de la influencia del mallado se compararon los resultados de dos simulaciones, una con red uniforme y otra como la de la Fig. 4.26 bajo las mismas condiciones que en el primer apartado, salvo las siguientes variaciones:

- La superficie de la probeta fue iluminada con un haz de modo TEM_{01}^* de $w = 8$ mm de anchura.
- El lado de los cubos pequeños quedó en 0.889 mm y el de los grandes en 2.667 mm.
- El tiempo se discretizó en intervalos de 0.0151 s.

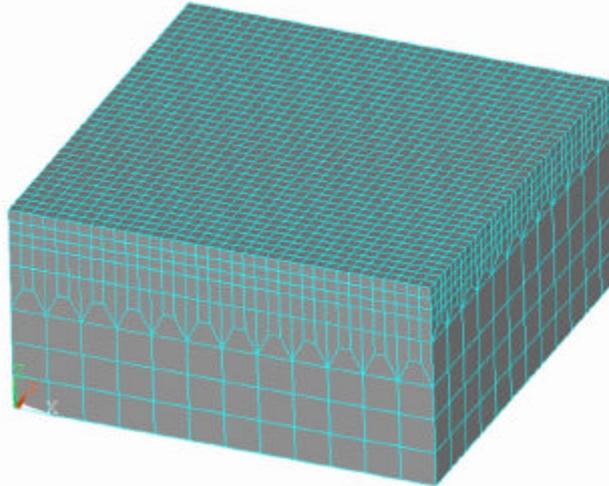


Fig. 4.26 El uso de trapecios permite, en dos transiciones, pasar de un elemento cúbico de lado D a otro de arista $3D$.

En [4.81] se ve una comparación entre las simulaciones de las dos mallas. Nos fijamos en tres magnitudes: el tiempo de CPU consumido, el número de nodos y la temperatura máxima de un punto situado en el centro de la superficie iluminada.

	Malla uniforme	Malla con transiciones
Tiempo (s)	674.505	202.765
Nº. Nodos	26011	7833
Temperatura (K)	335.41	335.13

[4.81]

La conclusión es clara: el uso de una malla de estas características no afecta a la precisión del resultado (que es de $\epsilon = 1.2\%$) pero produce un ahorro significativo de tiempo y memoria en la ejecución de la simulación.

Por último, cabe destacar que, aunque tiene que haber una relación entre las dimensiones superficiales de la malla origen (la más densa) y destino (la más gruesa), no es necesario mantener esta multiplicidad entre las alturas. Por ejemplo, sería válido conectar una red uniforme compuesta de elementos de $1 \times 1 \times 1 \text{ mm}^3$ con retículos $3 \times 3 \times 7 \text{ mm}^3$. Esto permitiría reticular probetas con un número aceptable de nodos con una buena combinación de transiciones trapezoidales entre elementos y una elección apropiada de sus dimensiones en la dirección Z. Esta ventaja será tanto más satisfactoria cuanto mayor sean las dimensiones de la geometría, por el contrario, tendría como desventaja la complicación del código empleado para generar este tipo de malla.

Influencia del ángulo de deformación: geometría cilíndrica

En las situaciones donde se necesita tratar con una geometría curva, como son aros y cilindros, al aplicar una reticulación homogénea los elementos disminuyen progresivamente de volumen según se alejan de la superficie y, con buen criterio, es de suponer que esta curvatura influirá en la distribución de temperaturas.

Para manifestar esta posible relación se compararon las soluciones teórica [4.82] y numérica en función del radio, cuando un cilindro tiene sus paredes externa e interna sometidas a temperatura constante (Myers, 1998).

$$T_{teor}(r) = T_{int} + \frac{T_{ext} - T_{int}}{\lg(r_{ext}/r_{int})} \lg(r/r_{int}) \quad [4.82]$$

Para evaluar el error introducido por la curvatura de la geometría se modelizaron arcos de cilindros de 32 mm tanto de longitud como de anchura, 8 mm de grosor y radio variable. La geometría fue reticulada uniformemente con elementos de 2 mm de arista, de modo que su volumen menguaba progresivamente según se alejaban de la superficie exterior (Fig. 4.27). Las paredes externa (r_{ext}) e interna (r_{int}) permanecieron a temperatura constante de 800 y 300 K respectivamente comparando los valores de la temperatura en la mitad de la vertical sobre el centro.

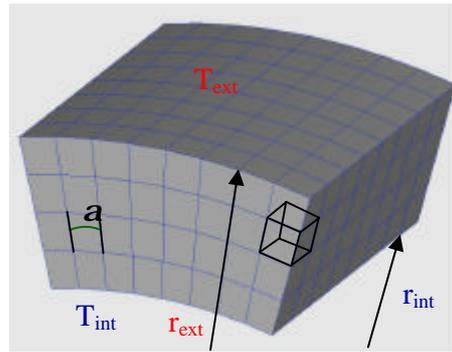


Fig. 4.27 Ejemplo de malla de un arco. El ángulo a queda definido entre dos radios consecutivos.

En la gráfica (Fig. 4.28) se representa la relación existente entre el error absoluto de la temperatura y el ángulo a que forman dos radios consecutivos:

$$\mathbf{a} = 2 \arcsin \left(\frac{\Delta x}{2r_{ext}} \right) \quad [4.83]$$

La conclusión que se extrae es que el ángulo de concavidad de los elementos tiene una influencia pequeña en los resultados de la simulación.

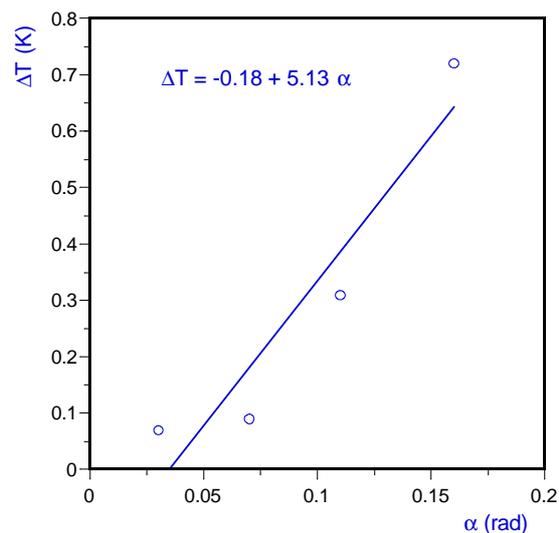


Fig. 4.26 Error absoluto de la temperatura ΔT frente al ángulo a .

Influencia de la discretización del haz

La simulación del haz láser se hace sobre una superficie reticulada sobre la que, como ya estudiamos, las variaciones en la red superficial no tienen influencia en la precisión de la temperatura. Ahora bien, este resultado se cumple en áreas uniformemente iluminadas; en las situaciones reales la distribución transversal del haz no es esta.

Para estudiar la influencia en el error de la discretización del láser se llevó a cabo un análisis de varias distribuciones TEM_{01*} de diferente ancho. En las mismas condiciones que en el primer apartado, se reticuló la celda con dimensión fija $L=1\text{ mm}$ pero con una potencia de 200 W.

En la gráfica (*Fig. 4.29*) se quiere representar el error relativo de la temperatura frente al cociente entre la anchura w del modo TEM_{01*} y la dimensión L del elemento empleado para su reticulación.

$$C = \frac{w}{L} \quad [4.84]$$

Esta fracción define la calidad de la discretización de la sección transversal del haz. El orden de convergencia obtenido fue de 0.57.

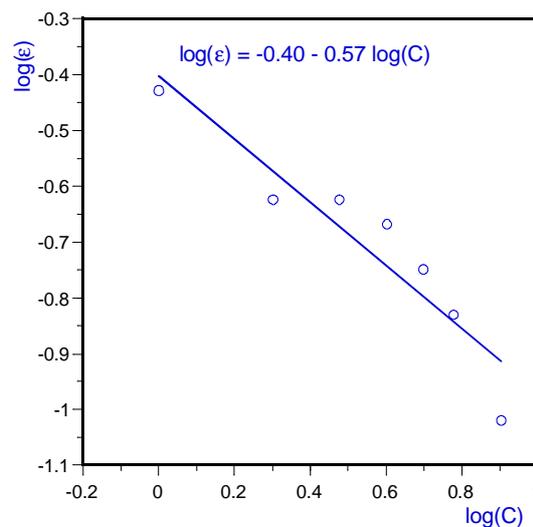


Fig. 4.29 Error relativo de la temperatura, frente a la calidad de discretización del haz C . El orden de convergencia es de 0.57

Influencia de la discretización superficial sobre el movimiento de la fuente

En los tratamientos térmicos con láseres es habitual intentar alcanzar el estado estacionario desplazando la fuente respecto de la pieza. En esta traslación la morfología de la fuente sufre las alteraciones introducidas para adaptarse a la discretización de la malla.

Una probeta ortoédrica de $64 \times 32 \times 16 \text{ mm}^3$ y las mismas propiedades que en los anteriores apartados, fue iluminada con una fuente rectangular de $8 \times 32 \text{ mm}^2$ de 200 W que se desplazó con una velocidad de 10 mm s^{-1} desde un extremo de la pieza al contrario (el tiempo de la simulación fue de 6.4 s). En 4.30a, que representa la temperatura máxima frente al tiempo, se ve que como consecuencia de este movimiento aparecen pequeñas oscilaciones en la temperatura del estado estacionario. Una ampliación de la región central nos permite identificar dos frecuencias en la fluctuación de la temperatura (Fig. 4.30b).

En 4.30c está representada la solución analítica para este mismo caso. Se observa claramente que no aparece la oscilación de baja frecuencia, entonces esta debe ser consecuencia del proceso de cálculo de ANSYS™.

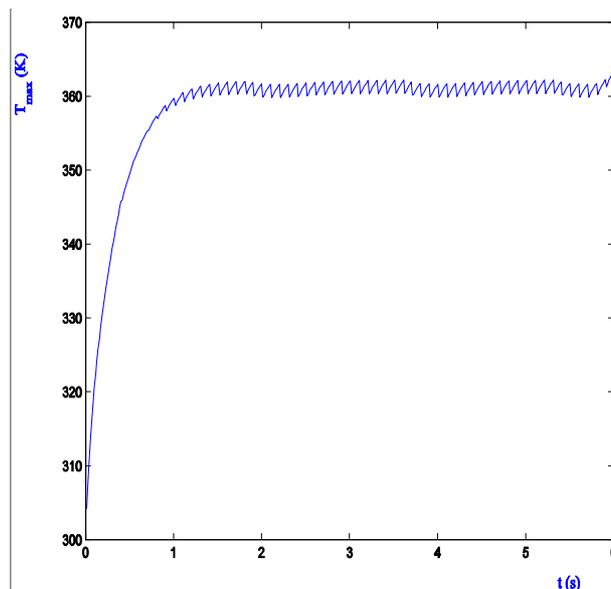


Fig4.30 (a) Temperatura máxima frente al tiempo. El estado estacionario se alcanza a 360 K.

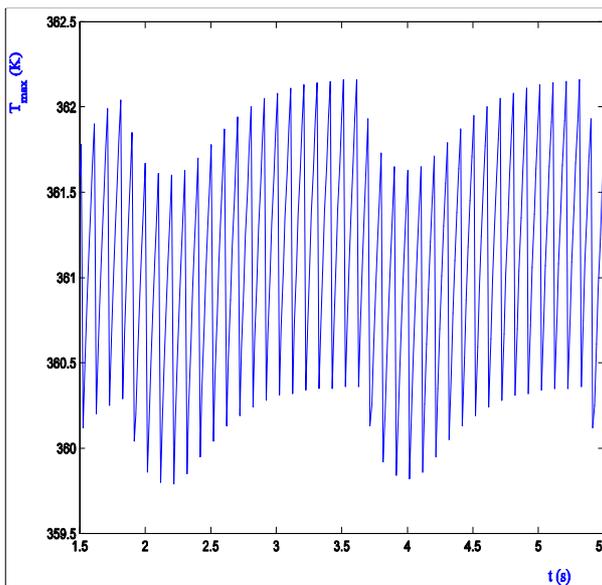


Fig. 4.30 (b) Una ampliación de la región central permite identificar una oscilación de baja y otra de alta frecuencia.

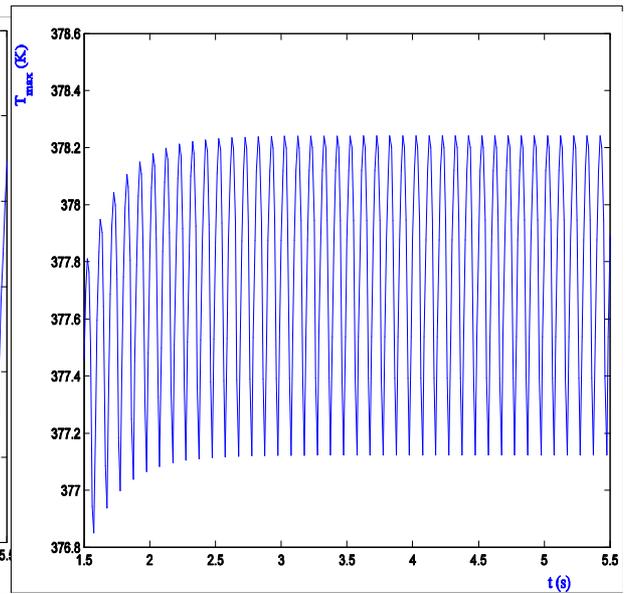


Fig. 4.30 (c) Solución analítica del modelo. No aparece la oscilación de baja frecuencia.

Las oscilaciones de baja frecuencia tienen su origen en la técnica empleada para resolver el modelo de elementos finitos, el gradiente conjugado de Jacobi: el proceso se inicia con una semilla de iteración tomada al azar, una vez calculada la distribución de temperaturas para el primer paso temporal se emplea ésta como semilla en el siguiente incremento de tiempo y así sucesivamente hasta que la solución se sitúa fuera del criterio de tolerancia de la temperatura y del flujo calorífico, en esta instancia se vuelve a elegir al azar una nueva semilla repitiendo el procedimiento.

Para estudiar la relación existente entre estas oscilaciones y el tamaño de la malla se escogió un modelo de similares propiedades a los dos anteriores apartados:

- La geometría de la pieza ($64 \times 32 \times 16 \text{ mm}^3$) se discretizó homogéneamente con elementos cúbicos de 1 mm de arista (una mitad) y otros de tamaño variable. La función de la primera malla consistió únicamente en servir de referente una vez alcanzado el estado estacionario. El tamaño del paso temporal se fijó en 0.0125 s.
- La fuente de 200 W cubrió una superficie de $8 \times 32 \text{ mm}^2$ moviéndose en la dirección paralela al eje X con una velocidad de 20 mm s^{-1} recorriendo en su totalidad la longitud de la probeta.

Para analizar los resultados, primeramente se separaron las oscilaciones de alta y baja frecuencia y una vez filtradas se estudiaron el período y la amplitud de la fluctuación de alta frecuencia. Fueron realizados los siguientes ensayos:

Δx (mm)	Período (s)	Amplitud (K)
0.8	0.04	1.38
1	0.05	1.69
2	0.0982	4.10
4	0.1958	5.60

Esto nos permite llegar a las siguientes conclusiones:

- Como se puede ver en la gráfica 4.31, existe una relación entre el tamaño de la malla, el período de la oscilación de alta frecuencia y la velocidad de desplazamiento de la fuente.
- El período de oscilación de alta frecuencia es:

$$P = \frac{\Delta x}{v} \quad [4.85]$$

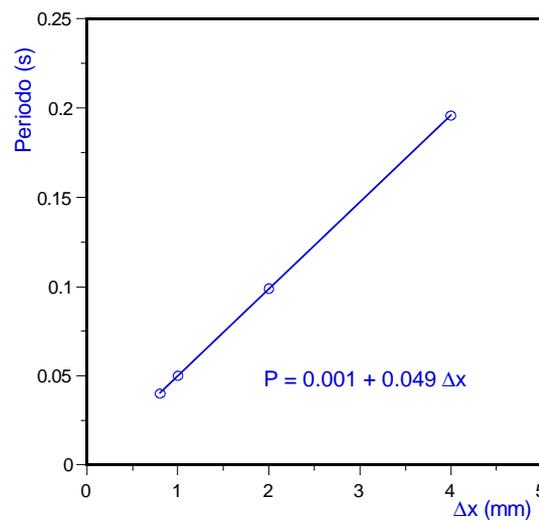


Fig. 4.31 Período frente al tamaño de la malla. La pendiente coincide con la inversa de la velocidad.

4. Desarrollo de un modelo de tratamiento térmico con láser

- La amplitud de la oscilación de la alta frecuencia es proporcional al tamaño del elemento en la dirección del movimiento (Fig. 4.32)

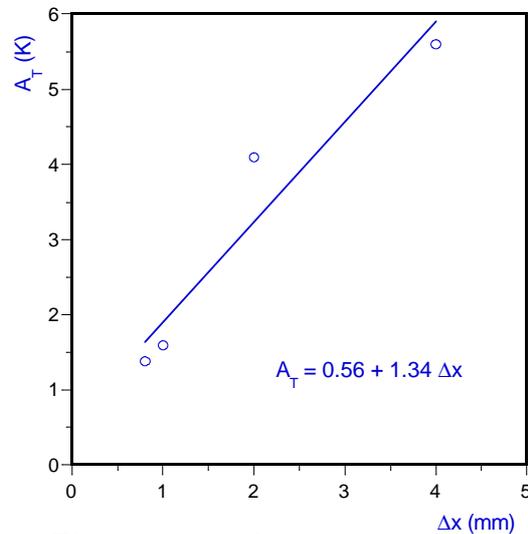


Fig. 4.32 Amplitud de la oscilación frente al tamaño de la malla.

Es necesario destacar que estas conclusiones tienen su rango de validez en los valores del número de Fourier $Fo \geq 5.4^2$ (para relaciones menores que 5.4 aparecen fluctuaciones muy irregulares) y del número de Peclet $Pe > 1$. Por ejemplo, siguiendo con el mismo experimento pero variando la velocidad y manteniendo el tamaño de la malla en 1 mm se realizaron las siguientes experiencias:

v (mm s-1)	Período (s)	Amplitud (K)	Peclet
25	0.0399	1.60	3.62
20	0.0499	1.79	2.90
15	0.067	2.01	2.10
10	0.01	2.23	1.45
5	0.2	0.38	0.72

La figura 4.33 representa la amplitud de la oscilación frente a la velocidad. Se ve claramente que todos los puntos están sobre una recta salvo el correspondiente a un número de Peclet por debajo de la unidad.

² ANSYS™ tiene como límite de fiabilidad el número de Fourier de 5.4

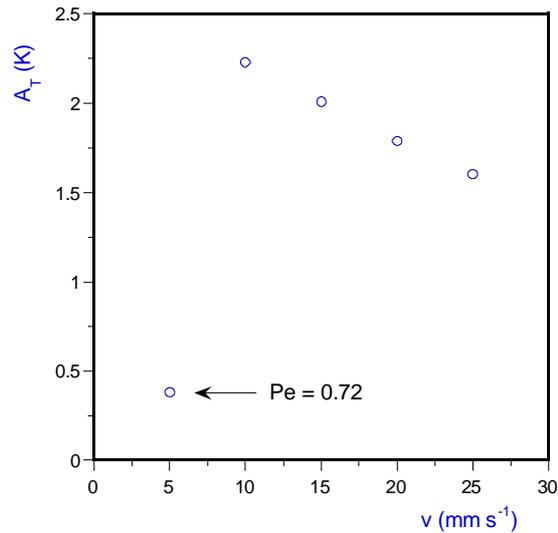


Fig. 4.33 Amplitud de la oscilación frente a la velocidad. El número de Peclet condiciona la relación entre las dos magnitudes.

Criterio de contraste

Conviene, una vez realizado el anterior estudio, llegar al enunciado de un criterio que permita optimizar las dimensiones del modelo numérico en función tanto del consumo de tiempo-memoria de procesamiento del ordenador, como de la exactitud de los resultados. En la siguiente tabla se ve un resumen de todos los órdenes de convergencia.

<i>Tipo de malla</i>	<i>Orden de Cvg.</i>
<i>Malla cúbica</i>	<i>1.61</i>
<i>Malla anisótropa</i>	<i>1.01</i>
<i>Malla mixta próxima</i>	<i>0.45, 0.75</i>
<i>Discretización del haz</i>	<i>0.57</i>
<i>Malla mixta distante</i>	<i>0.15</i>
<i>Paso temporal</i>	<i>0.016</i>

[4.85]

La comparación entre los distintos órdenes de convergencia obtenidos nos indica que la elección de una malla cúbica aumenta la precisión de la solución más rápidamente que con cualquiera de las otras posibilidades.

4. Desarrollo de un modelo de tratamiento térmico con láser

Así mismo se observa que el impacto del tamaño del paso de tiempo sobre la exactitud de la solución tiene escasa relevancia respecto a los otros órdenes de convergencia. No obstante, es necesario recordar que existe una relación entre esta división temporal y el tamaño de la malla, como queda reflejado en la ecuación [3.72].

Según los resultados compilados en [4.85], cualquiera de las tres variaciones de la malla (cúbica, anisótropa o mixta) producirán un efecto comparable en la precisión de la solución, alcanzándose un menor error en el caso de usar una malla cúbica. El análisis del consumo de memoria (*Fig. 4.34*) y de tiempo (*Fig. 4.35*) de procesamiento en el ordenador HPC 4500 del CESGA nos permite discriminar entre las tres posibilidades.

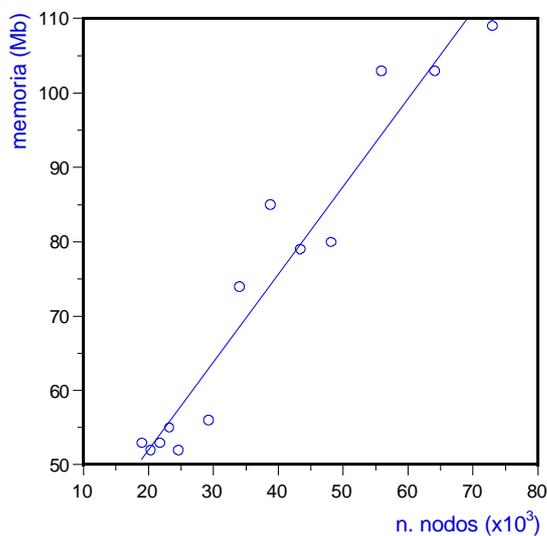


Fig. 4.34 Consumo de memoria de procesamiento en función del número de nodos. Los cálculos están realizados en la máquina Sun HPC 4500 del CESGA.

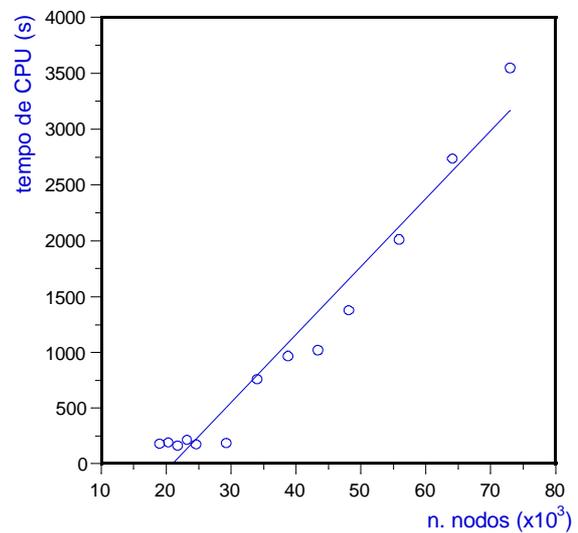


Fig. 4.35 Tiempo de ejecución del código ANSYS™ en función del número de nodos.

Para establecer un criterio de contraste emplearemos un ejemplo. Bajo las mismas condiciones de iluminación (una fuente uniforme cubriendo toda la superficie) e idénticas propiedades materiales se reticuló una probeta de material, de dimensiones $32 \times 32 \times 16 \text{ mm}^3$, con tres mallas diferentes: cúbica, anisótropa y mixta. Se eligieron los resultados de manera que el error relativo de la temperatura fuese lo más parecido en los tres casos, $e \leq 0.5\%$. En la siguiente tabla se cuantifican los tres tipos de mallas.

<i>Malla</i>	<i>Elemento patrón</i>	<i>N. nodos</i>
<i>Cúbica</i>	$0.8 \times 0.8 \times 0.8 \text{ mm}^3$	35301
<i>Anisótropa</i>	$8 \times 8 \times 0.5 \text{ mm}^3$	825
<i>Mixta próxima</i>	$4 \times 4 \times 0.1 \text{ mm}^3$	325
<i>Mixta distante</i>	$4 \times 4 \times 5 \text{ mm}^3$	

[4.86]

De la relación entre el número de nodos y el consumo de CPU, obtuvimos la siguiente conclusión: el uso de redes mixtas optimiza el modelo de elementos finitos al minimizar el tiempo y la memoria de procesamiento del ordenador. Con todo de no hacer un buen uso de esta malla podríamos obtener unos resultados muy imprecisos o un consumo excesivo de CPU, lo que inhabilitaría el modelo.

Bibliografía

- Álvarez, C. et al. (2001); *Real time control and monitoring of laser hardening process: applications to cylindrical workpieces*; Laser Assisted net Shape Engineering 3. Proceeding of the LANE 2001. Surface & Heat Treatment. 223-234.
- Bathe, J-K. (1996); *Finite element procedures*; Prentice Hall.
- Ceballos-Ruano, J.S. et al. (1998); *Tratamiento térmico superficial del acero U8 mediante láser de Nd:YAG*; Rev. Metal. Madrid, 34(2), 1998, 140-143.
- Doane, D.V., J.S. Kirkaldy (1977); *Hardenability with applications to steel*; Proceedings of a Symposium held at the Sheraton-Chicago Hotel. October 1977, pp. 518-545.
- Festa, R. et al. (1993); *Thermal design and experimental analysis of laser and electron beam hardening*; J. Eng. for Industry, Vol. 115, pp. 309-314.
- Gaspar, P. et al. (2000); *A study of the effect of wavelength on q-switched Nd:YAG laser cleaning of eighteenth-century Portuguese tiles*; Studies in Conservation 45 (2000) 189-200.
- Galantucci, L.M. et al.. (1997); *Laser heat treatment using variou overlapping degrees of the beam passes: a FEM transiente analysis*; Laser Assisted Net shape Engineering 2, Proceedings of the LANE'97, Meisenbach Bamberg.
- Inoue, T., K. Arimoto (1997); *Development and implementation of CAE system "HEARTS" for heat treatment simulation baser on metallo-thermo-mechanics*; J. Mat. Eng. Perf., Vol. 6(1), pp. 51-60.
- Johnson, C. (1978); *Numerical solution of partial differential equations by finite element method*; Cambridge University Press.
- Kopel, A., W. Reitz (1999); *Laser surface treatment*; Advanced Materials & Processes, pp. 39-41.
- Kou, S. et al. (1983); *A fundamental study of laser transformation hardening*; Metallurgical Transactions A, vol. 14A, April 1983 pp. 643-653.
- Laroudie, F., C. Tassin, M. Pons (1995); *Hardening of 316L stainless steel by laser surface alloying*; J.M.S. Vol. 30, pp. 3652-3657.
- Melander, M. (1985); *A computational and experimental investigation of induction and laser hardening*; Tese Doutoral.
- Myers, G.E. (1998); *Analytical methods in conduction heat transfer, 2nd Ed.*. AMCHT

- Rozzi, J.C. et al. (1998); *Transient thermal response of rotating cylindrical silicon nitride workpieces subjected to a translating laser heat sources, part II: parametric effects an assessment of a simplified model*; J.H.T., November 1998, vol. 120 pp. 907-915.
- Saavedra, E. Et al. (2000); *Predicción de la evolución de la temperatura durante el tratamiento térmico de materiales metálicos por láser*; Anales de la Ingeniería Mecánica. Año 13, Vol. 3, diciembre 2000, pp. 1759-1764.
- Shiue, R.K., C. Chen (1992); *Laser transformation hardening of tempered 4340 steel*; Metallurgical Transactions A, Vol. 23 A, pp. 163-170.
- Wang, J-T., Hwang, C-C. (2000); *The influence of temperature and surface conditions on surface absorptivity in laser surface treatment*; Journal of Applied Physics, Vol. 87, No. 7, pp. 3245-3253.
- Yang, L.J. et al. (1990); *The effects of overlapping runs in the laser-transformation hardening of tool-steel specimens*; Journal of Materials Processing Technology, 23 (1990) 133-147 Elsevie
- Yáñez, A. et al. (2001); *Modelling of temperature evolution on metals during laser hardening process*; Applied Surface Science 186 (2002) 611-616.

4.3 Modelo de transformaciones metalúrgicas de los aceros al carbono

En este apartado se presentará un método para, a partir de la distribución de temperaturas sobre un acero, cuantificar la composición de las fases y la dureza del tratamiento de temple.

4.3.1 Transformaciones de fase

El modelo para las transformaciones de fase se basa en los diagramas de transformación isotérmicos y en las ecuaciones de Johnson-Mehl-Avrami y Koistinen-Marburger. La primera de estas ecuaciones se aplica a las transformaciones controladas por la difusión del carbono, tanto en el proceso de formación de la austenita, durante el calentamiento de la pieza, como en la descomposición de la austenita en ferrita, cementita, perlita y bainita. Por el contrario, la ecuación de Koistinen-Marburger se emplea para calcular la transformación martensítica durante el enfriamiento.

En los procesos dominados por la difusión, la fracción volúmica de la fase k formada cuando el material se mantiene un tiempo t a la temperatura T viene dada por

$$y_k(t) = 1 - \exp\{-b_k t^{n_k}\} \quad [4.88]$$

donde b_k y n_k son parámetros dependientes de la temperatura.

Para cuantificar las transformaciones de las fases modelamos la curva de temperatura-tiempo mediante una serie de escalones, es decir, pequeños pasos de tiempo isotérmicos conectados entre sí por cambios de temperatura sobre las líneas de conversión de fase constante, como se muestra en la figura 4.36.

En cada uno de estos pasos isotérmicos la determinación del porcentaje de fase formada se calcula como se describe a continuación:

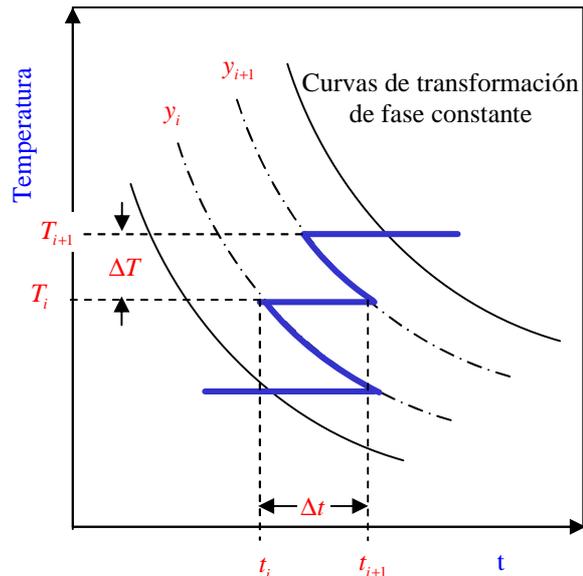


Fig. 4.36 Esquema de aplicación del método. Las coordenadas inicial y final se conectan por medio de pasos isotérmicos y otros a fracción volúmica constante.

Se determinan las constantes n_k y b_k a la temperatura T_i a partir de los tiempos y fracciones volúmicas de comienzo (t_s, y_s) y remate (t_f, y_f) de una transformación siendo muy común considerar el inicio cuando el porcentaje de la nueva fase alcanza el 1% y el 99% para el final, aunque se pueden emplear otros porcentajes (ASM, 1991).

$$n_k = \frac{\log \left[\frac{(1 - y_s)}{(1 - y_f)} \right]}{\log \left[\frac{t_s(T)}{t_f(T)} \right]} \quad [4.89]$$

$$b_k = \frac{-\ln(1 - y_s)}{[t_s(T)]^{n_k}}$$

En cada uno de estos pasos isotérmicos el cálculo del porcentaje de la fase formada está determinado por la ecuación

$$y_{k,i} = 1 - \exp \left\{ -b_k (t'_i + \Delta t_i)^{n_k} \right\} \quad [4.90]$$

donde el tiempo t'_i se calcula a partir de [4.88] para la concentración del paso $i-1$:

$$t'_i = \left\{ \left[-\ln(1 - y_{i-1}) \right] / b_k \right\}^{1/n_k} \quad [4.91]$$

En los ciclos térmicos distinguiremos dos etapas: calentamiento y enfriamiento.

- Durante la etapa de calentamiento se aplica el método anterior sobre el diagrama ITh (Fig. 4.37) introduciendo la modificación de Ericson (Sanesteban, 2002):

$$y_{k,i} = y_k \Big|_{\max} \left[1 - \exp\{-b_k t_i^{n_k}\} \right] \quad [4.92]$$

donde la constante $y_k \Big|_{\max}$ representa la máxima fracción volúmica del constituyente k que se puede formar a una temperatura. La presencia de este término lleva implícito el principio de aditividad: la composición final de una fase será la suma de las fracciones parciales de cada transformación (Archambault, 1997).

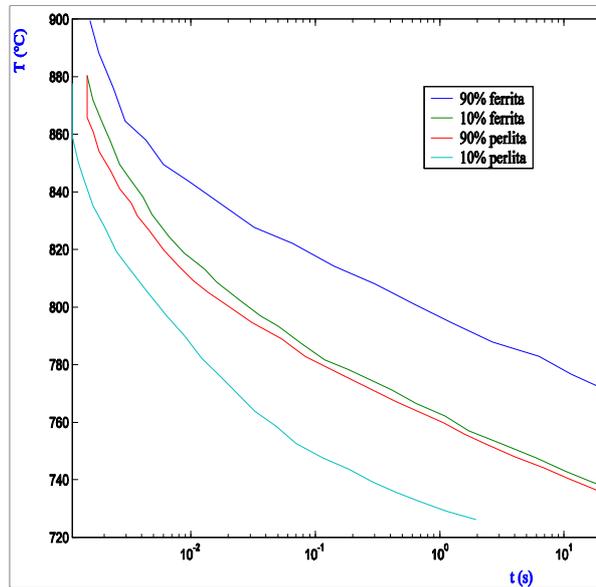


Fig. 4.37 Diagramas ITh para el acero F114.

En 4.38 se representa el ciclo térmico correspondiente a 0.7 mm de profundidad de una probeta cilíndrica (radios interior y exterior igual a 12.5 y 20.5 mm) de acero F114 producidos por una fuente de 969 W con velocidad relativa de 10 mm s^{-1} y estructura transversal de TEM₀₁* de 3 mm anchura.

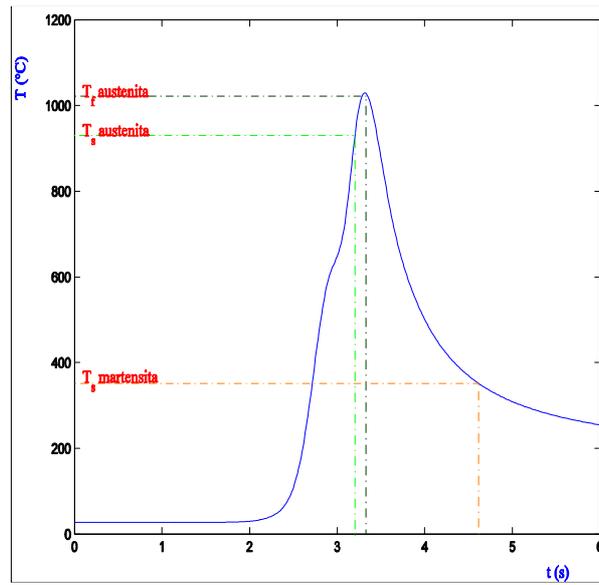


Fig. 4.38 Temperatura frente al tiempo a 7 mm de profundidad. Están indicadas las temperaturas del inicio y fin del proceso de formación de martensita y austenita.

En la siguiente gráfica (Fig. 4.39) se ve un ejemplo de la aplicación de este método.

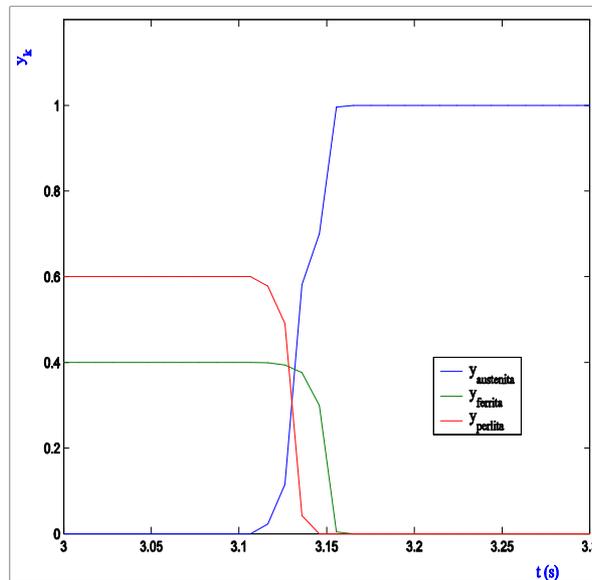


Fig. 4.39 Fracción volúmica de las distintas fases frente al tiempo, durante el calentamiento del acero.

- Durante la etapa de enfriamiento se modifica el modelo empleado para incorporar la nucleación previa al crecimiento por difusión. En el proceso de descomposición de la austenita en perlita o bainita se distinguen dos etapas: germinación y crecimiento.

La germinación se modeliza con el principio de aditividad de Scheil (ASM, 1991) (Braz, 1985) (Sanesteban, 2002). Para cada paso se calcula la relación entre la longitud del intervalo temporal y el tiempo necesario para que se forme el 1% de una componente en una transformación isoterma:

$$\sum_i \frac{\Delta t_i}{t(T_i)} \quad [4.93]$$

donde Δt_i representa el paso temporal y $t(T_i)$ el tiempo de incubación de la transformación isotérmica a la temperatura T_i . Cuando esta suma alcanza la unidad el período de germinación queda finalizado dando comienzo una nueva etapa.

Durante la fase de crecimiento las transformaciones austenita \rightarrow ferrita, austenita \rightarrow perlita y austenita \rightarrow bainita se cuantifican con la ecuación:

$$y_{k,i} = y_{aus} y_k \Big|_{\max} \left[1 - \exp\{-b_k t_i^{n_k}\} \right] \quad [4.94]$$

El término y_{aus} representa el porcentaje de austenita formada en el calentamiento.

Una vez cuantificadas las transformaciones por difusión la fracción en volumen de la martensita formada dependerá únicamente de la temperatura alcanzada por debajo de M_s (temperatura de comienzo de la formación de la martensita) y vendrá dada por la ecuación de Koistinen-Marburger:

$$y_{martensita} = y_{aus} \left[1 - \exp\{-g(M_s - T_{fin})\} \right] \quad [4.95]$$

donde g es un coeficiente que toma el valor 0.011 para aleaciones Fe-C con un contenido entre el 0.37% y el 1.1% de C y T_{fin} representa la temperatura final del proceso. En la gráfica 4.41 obtenida a partir del ciclo térmico Fig. 4.38 se ve un resultado de esta aplicación.

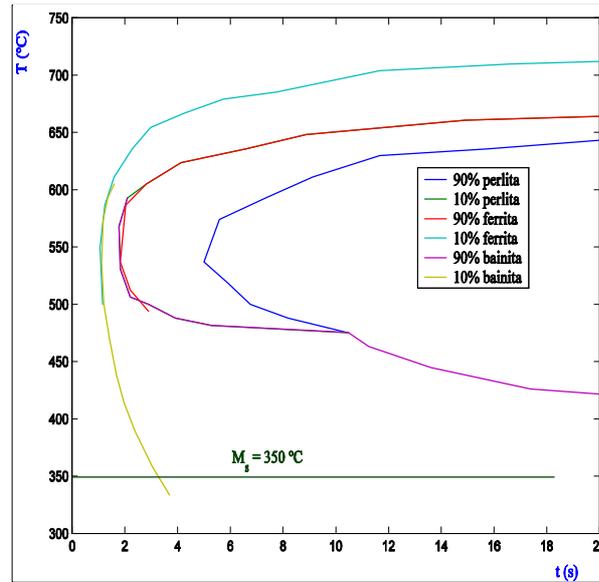


Fig. 4.40 Diagrama TTT de enfriamiento isotérmico para el acero F114.

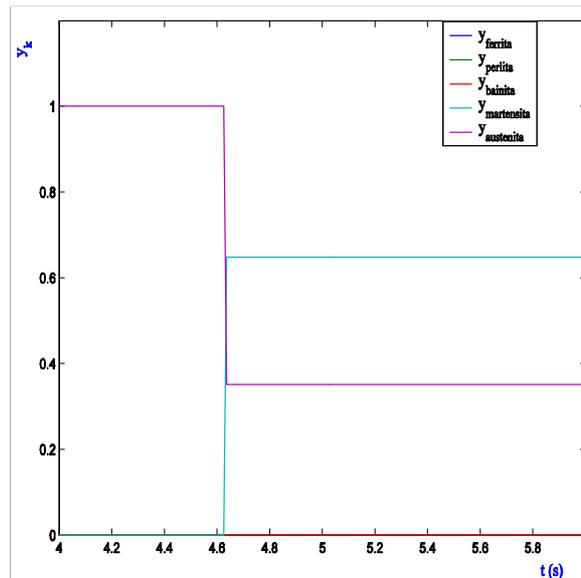


Fig. 4.41 Fracción volúmica de las distintas fases frente al tiempo durante el enfriamiento del acero F114.

4.3.2 Endurecimiento

Una vez determinada la concentración de las distintas fases correspondientes a cada ciclo térmico se puede estimar la dureza alcanzada en cada punto de la pieza. Para esto emplearemos un conjunto de ecuaciones empíricas que relacionan la dureza en Vickers (H_v) con la composición del material, la fracción de las fases presentes y la velocidad de enfriamiento. Por ejemplo, para la martensita, la bainita y la fase ferrita+perlita: (Doane, 1977) (Victor, 1998)

$$\begin{aligned}
 H_{v_m} &= 127 + 949C + 11Mn + 21\log(v_{fr}) \\
 H_{v_b} &= -323 + 185C + 153Mn + (89 + 53C - 22Mn)\log(v_{fr}) \\
 H_{v_{f+p}} &= 42 + 223C + 30Mn + 10\log(v_{fr})
 \end{aligned}
 \tag{4.96}$$

De modo que la dureza en cada punto de la pieza es:

$$H_v = X_m H_{v_m} + X_b H_{v_b} + (X_f + X_p) H_{v_{f+p}}
 \tag{4.97}$$

donde H_v representa la dureza en Vickers y H_{v_i} la de las distintas fases, X_i representa la composición en tanto por uno de cada una de las fases, C y Mn son el tanto por cien de carbono y manganeso presentes en el acero y, por último, v_{fr} representa la velocidad media de enfriamiento cuando la temperatura baja de 750 a 650 °C, medida en grados centígrados por hora. La dispersión ($2s$) de H_v es de 13 Vickers para valores de la velocidad de enfriamiento entre 814 y 1.5×10^5 grados centígrados por hora (Doane, 1997).

Bibliografía

- Álvarez¹, J.C., et al (2001); *Real time control and monitoring of laser hardening process application to cylindrical workpieces*; Proceeding of the LANE 2001, Ed. M. Geiger & A. Otto, Meisenbach.
- Archambault, P. et al. (1997); *Inverse resolution of the heat-transfer equation with internal heat source: application to the quenching of steels with phase transformations*; JMEPEG, 6:240-246.
- ASM Handbook (1991); *Volume 4, Heat treating*; ASM International.
- Braz, F.M. et al. (1985); *Mathematical model coupled phase transformation and temperature evolution during quenching of steels*; Materials Science and Technology, Vol. 1, pp. 838-844.
- Doane, D.V., J.S. Kirkaldy (1977); *Hardenability with applications to steel*; Proceedings of a Symposium held at the Sheraton-Chicago Hotel. October 1977, pp. 518-545.
- Farias, D. (1991); *Traitement thermique laser de l'acier XC42 et modélisation des transformations de phases en cycles thermiques rapides au chauffage et au refroidissement*; Thèse de doctorat, I.N.P.L., Nancy.
- Melander, M., J. Nicolov (1985); *Heating and cooling transformation diagrams for the rapid heat treatment of two alloy steels*; American Society for Metals, Vol. 4, No. 1, June 1985.
- Sanesteban, J. (2002); *Desarrollo de un modelo numérico para la predicción del endurecimiento superficial de aceros procesados con láser*; Trabajo presentado a la comisión de doctorado del Departamento de Ingeniería Industrial II.
- Victor, M. et al. (1998); *A computational model for the prediction of steel hardenability*; Metallurgical and Materials Transactions B. Vol. 29B, June 1998, pp. 661-672.
- Wang, K.F., S. Chandrasekar, H.T.Y. Yang (1997); *Experimental and computational study of the quenching of carbon steel*; JMSE, Vol. 119, pp257-265

Capítulo 5

Evaluación experimental

5.1. Diseño de los experimentos

5.1.1. Instrumentación

5.1.2. Tomas de datos

5.1.3. Dispositivo experimental

5.1.3.1. Determinación de la absorptividad del acero

5.2. Endurecimiento superficial

5.2.1. Geometría Plana

5.2.2. Geometría cilíndrica

Este penúltimo capítulo tiene como objeto el de presentar al lector tanto los medios disponibles para la realización de esta Tesis como los resultados del modelo.

Comenzaremos haciendo referencia al material de laboratorio e informático empleado en la investigación y una vez hecho esto describiremos el montaje experimental usado en el temple del acero F114. La calibración de un pirómetro y la obtención del coeficiente de absorción de la superficie del material merecerá un tratamiento más en detalle.

El último apartado estará dedicado íntegramente a la presentación de los resultados de endurecimiento de dos probetas de acero F114, una con forma de placa y la otra con la estructura de un arco de un cilindro.

5.1 Diseño de los experimentos

En nuestro laboratorio el diseño de los experimentos del tratamiento térmico superficial de aceros con láser se articula en torno a cuatro etapas:

- Obtención, mediante el método de los números adimensionales, de los valores más adecuados para los parámetros del procesado con láser (potencia, velocidad relativa haz-material y tamaño del modo TEM_{01*}).
- Simulación con el código de elementos finitos ANSYSTM teniendo en cuenta la dependencia con la temperatura de las propiedades del material.
- Tratamiento de la probeta con un láser de CO₂ de alta potencia.
- El análisis de resultados se hace en dos etapas.
 - Estudio experimental. Consta de una preparación inicial de la probeta (corte de una muestra, embutido y pulido), para después haciendo uso de un microdurómetro, medir la dureza de la zona tratada.
 - Comparación con la predicción teórica de la distribución de la dureza. Mediante un modelo numérico basado en aproximar las transformaciones de fase por medio de pasos isotermos y otros de transformaciones constante y las fórmulas de Kirkaldy, se construye un mapa de durezas con la distribución de temperaturas proporcionada por el método de los elementos finitos (Doane, 1996) (Inoue, 1997) (Melander, 1985) (Wang, 2000).

5.1.1 Instrumentación

En este apartado hacemos una descripción de la instrumentación empleada en nuestros laboratorios

5. Evaluación experimental

Para la estimación de los parámetros del tratamiento se usan varios programas que aplican el método de las imágenes o los números adimensionales, escritos en el lenguaje Matlab v. 6, soportado en un ordenador escalar paralelo Sun Microsystem HPC 4500 propiedad del Centro de Supercomputación de Galicia (CESGA). Algunas de sus características técnicas se resumen en la siguiente tabla:

SUN HPC 4500	
Arquitectura:	Shared Memory Processor
Número de procesadores:	12
Tipo de procesadores:	Ultra SPARC-2 400 MHz
Potencia de cálculo:	9.6 Gflops (pico)
Memoria:	4 GB SDRAM
Disco:	36 GB
Sistema operativo:	SUN Solares 2.6

[5.1]

Para la modelización con el método de los elementos finitos se escribió un código escrito en Fortran 77 que sirve de enlace entre el usuario y el programa ANSYSTM, también soportado en la máquina Compaq HPC 320 del CESGA.

COMPAQ HPC 3200	
Arquitectura:	Cluster of 8 SMP servers
Número de procesadores:	32
Tipo de procesadores:	Alpha EV68 1 GHz
Potencia de cálculo:	64 Gflops (pico)
Memoria:	80 GB
Disco:	2 tB
Sistema operativo:	Tru64

[5.2]

Para el tratamiento con láser el equipamiento empleado consta de:

- un resonador Rofin Sinar modelo RS 2000 SM que emite un haz linealmente polarizado (que cambia a polarización circular al reflejarse en un espejo $I/4$),

RS 2000 SM	
Longitud de onda:	10.6 μm
Excitación:	Corriente continua
Potencia máx:	2000 W \pm 2 %
Divergencia del haz:	\leq 1.5 mrad
Modo transversal:	TEM ₀₁ *
Polarización:	Lineal \rightarrow circular
Duración del pulso:	100 μs - CW

[5.3]

- un cabezal de salida que puede montar, alternativamente, dos lentes (f_1 o f_2), con un sistema de aportación de gas para proteger el tratamiento,

Lentes	
Material:	Seleniuro de zinc (ZnSe)
Diámetro:	38.1 mm
Focal ₁ :	127 mm
Focal ₂ :	190.5 mm

[5.4]

Gas de aporte	
Composición:	N ₂ , Ar o He
Presión:	\geq 10 ⁵ Pa

[5.5]

- una mesa de coordenadas con tres grados de libertad, dos horizontales y uno vertical, y un torno que, excepcionalmente, aporta un grado extra.

Mesa de coordenadas	
Ejes:	2 horizontales 1 vertical (cabezal)
Precisión en la posición:	\leq 0.1 mm
Velocidad máx.:	105 mm/min

[5.6]

- y un pirómetro.

Pirómetro	
Rango de temperatura:	723 – 2123 K
Precisión:	1 %
Rango de longitudes de onda:	2 – 2.5 μm
Focal de la lente:	650 mm
Diámetro del área registrada:	1.5 mm
Emisividad de la superficie:	0 – 0.99 (intervalos de 0.01)

[5.7]

Para el análisis del tratamiento, utilizamos:

Cortadora:	Struers Labotom - 3
Embutidora:	Struers Labopol - 3
Pulidora:	Struers Labopol - 1
Microdurómetro:	Shimadzu HMV -2 Series

[5.8]

Por último, para la investigación teórica de la distribución de la dureza se emplea un programa escrito en MatLab v. 6 ejecutado en el HPC 320 del CESGA, [5.2].

5.1.2 Toma de datos

En el experimento hay tres estadios que generan medidas, que son registradas para su análisis posterior:

- La aplicación del método de las imágenes genera un archivo de ternas posición-tiempo-temperatura en formato texto.
- La ejecución del código ANSYSTM da como resultado la distribución de temperaturas frente al tiempo del conjunto de nodos seleccionados. Una vez tratados se consiguen los ciclos térmicos de los distintos puntos.
- El pirómetro está conectado a una tarjeta de lectura instalada en un ordenador personal tipo PC esta placa tiene los siguientes parámetros:

National Instruments	
Caudal:	5 10 ⁵ registros p. s.
Período:	20 ms

[5.9]

5.1.3 Dispositivo experimental

El montaje experimental para el tratamiento de una geometría plana se esquematiza en el gráfico 5.1. El haz láser, que incide perpendicularmente a la superficie XY , tiene una velocidad relativa a la pieza en el sentido del semieje OX^+ . Las posiciones del pirómetro, en rojo, y del fotodetector, en verde, permiten conocer y controlar, se así fuera el caso, la máxima temperatura sobre la superficie del acero. La ventana azul permite, mediante un sistema de guiado con láser, dirigir el pirómetro hacia la coordenada donde se espera la máxima temperatura (Álvarez², 2001).

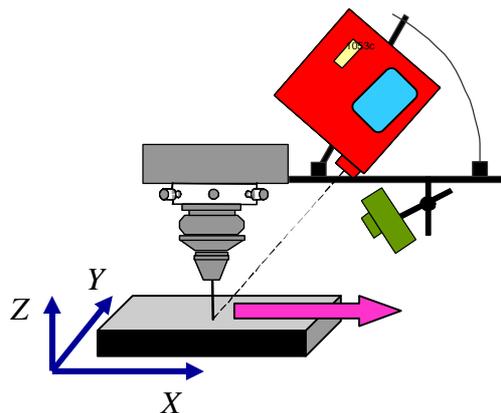


Fig. 5.1 Esquema del montaje. El pirómetro en rojo y el fotodetector en verde, permiten una lectura in situ de la temperatura superficial.

En el gráfico 5.2 se puede ver el montaje experimental para el tratamiento de un aro. El haz láser, que incide perpendicularmente a la superficie exterior del aro, tiene una velocidad relativa a la pieza constante en el sentido del vector director \hat{i} .

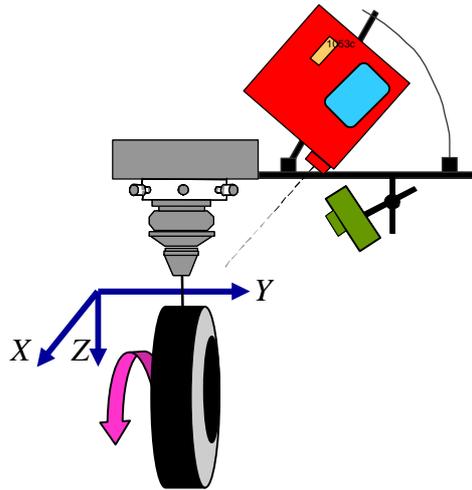


Fig. 5.2 Esquema del montaje. El pirómetro (en rojo) y el fotodetector (en verde) permiten una lectura in situ de la temperatura superficial.

5.1.3.1 Determinación de la absorptividad del acero

Para obtener unas buenas medidas con el pirómetro hay que tener en consideración tres aspectos de su montaje y manejo: selección de la dirección de enfoque, corrección de la emisividad y determinación del coeficiente de absorción.

- El sistema empleado para apuntar el pirómetro (Álvarez², 2001) está formado por un láser que, al iluminar por el interior a través del visor azul hasta alcanzar la superficie de la probeta, proyecta un punto que servirá de guía donde focalizar las medidas (Fig. 5.1 e 5.2). La coordenada que se selecciona para medir la temperatura es $X_{máx}$, ya obtenido con un método analítico.
- Para corregir la emisividad se eligen los parámetros del proceso hasta alcanzar la fusión en la superficie, usando la temperatura de cambio de fase para calibrar el pirómetro.
- El método de determinación del coeficiente de absorción de la superficie del material también emplea el cambio de fase sólido-líquido como referencia. El procedimiento consiste en elevar la temperatura del acero mediante un aporte continuo de flujo calorífico pero manteniendo la potencia constante (velocidad

relativa igual a 10 mm s^{-1}) mientras que el pirómetro registrará la historia térmica de un punto. La magnitud que relacionaremos con el coeficiente de absorción va ser el tiempo transcurrido desde el comienzo de la iluminación hasta que se inicia el cambio de fase (t_f). Una vez determinado experimentalmente este valor de t_f se realizarán simulaciones con elementos finitos para distintos valores de la potencia hasta obtener un tiempo t'_f semejante al medido experimentalmente. Para reforzar la visualización del cambio de fase en la simulación numérica se supone un coeficiente de absorción de la fase líquida muy alto, del 90%. La relación entre ambas magnitudes de la potencia, la experimental y la calculada, nos darán el valor del coeficiente de absorción.

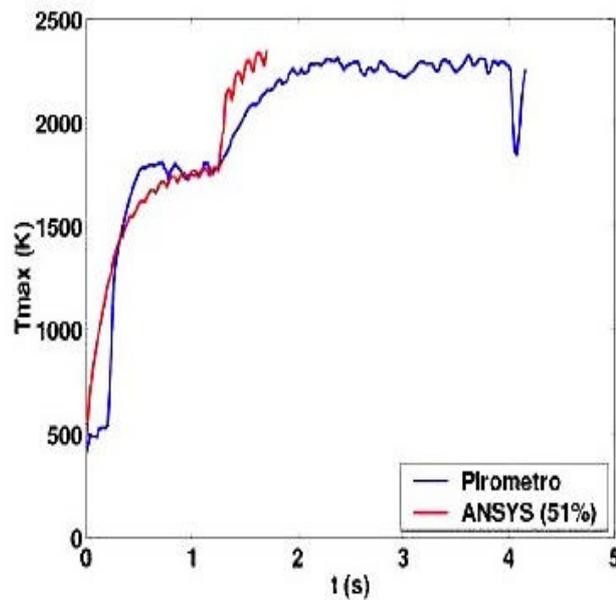


Fig. 5.3 Representación de la temperatura máxima frente al tiempo. Para $t_f = 1.2 \text{ s}$ el coeficiente de absorción es de 51%.

Para aumentar el coeficiente de absorción de la superficie ésta fue pintada de negro, obteniendo así un $t_f = 1.2 \text{ s}$ y un coeficiente de absorción del $51 \pm 2\%$.

Bibliografía

- Álvarez¹, J.C. et al.. (2001); *Real Time Control and Monitoring of Laser Hardening Process: Application to Cylindrical Workpieces* ; Proceedings of the LANE 2001 (Ed. M. Geiger y A. Otto. Meisenbach) Bamberg.
- Álvarez², J.C., et al (2001); *Sistema de puntería para pirómetro*; Patente P200101029, España (23-04-01).
- Ceballos-Ruano, J.S. et al. (1998); *Tratamiento térmico superficial del acero U8 mediante láser de Nd:YAG*; Rev. Metal. Madrid, 34(2), 1998, 140-143.
- Doane, D.V., J.S. Kirkaldy (1977); *Hardenability with applications to steel*; Proceedings of a Symposium held at the Sheraton-Chicago Hotel. October 1977, pp. 518-545.
- Festa, R. et al. (1993); *Thermal design and experimental analysis of laser and electron beam hardening*; J. Eng. for Industry, Vol. 115, pp. 309-314.
- Inoue, T., K. Arimoto (1997); *Development and implementation of CAE system "HEARTS" for heat treatment simulation baser on metallo-thermo-mechanics*; J. Mat. Eng. Perf., Vol. 6(1), pp. 51-60.
- Kopel, A., W. Reitz (1999); *Laser surface treatment*; Advanced Materials & Processes, pp. 39-41.
- Laroudie, F., C. Tassin, M. Pons (1995); *Hardening of 316L stainless steel by laser surface alloying*; J.M.S. Vol. 30, pp. 3652-3657.
- Melander, M. (1985); *A computational and experimental investigation of induction and laser hardening*; Tèse Doutoral.
- Shiue, R.K., C. Chen (1992); *Laser transformation hardening of tempered 4340 steel*; Metallurgical Transactions A, Vol. 23 A, pp. 163-170.
- Wang, J-T., Hwang, C-C. (2000); *The influence of temperature and surface conditions on surface absorptivity in laser surface treatment*; Journal of Applied Physics, Vol. 87, No. 7, pp. 3245-3253.

5.2 Endurecimiento superficial

En este apartado describiremos nuestro proceder para temprar con láser y analizaremos los resultados obtenidos durante la simulación y tratamiento de dos probetas de acero con geometrías plana y cilíndrica. Nuestros objetivos son:

- Concentrar el tratamiento en la superficie de una probeta de acero F114.
- Mantener la temperatura máxima lo más próxima posible a la de fusión (1723 K) pero sin que se produzca este cambio de fase.
- Extender lo más posible la región contenida en el interior de la isoterma A_{c3} , 1162.9 K (temperatura a la que comienza la transformación de la ferrita en austenita).
- Cerrar el ciclo térmico con un descenso rápido de la temperatura para que cristalice la mayor cantidad de martensita.

La metodología que vamos seguir consta de cinco etapas:

- Primeramente, considerando las propiedades térmicas del material como constantes, emplearemos un método analítico para la búsqueda de los parámetros del proceso: velocidad relativa haz-probeta, potencia y anchura del “spot”.
- Con el método de los elementos finitos obtendremos los ciclos térmicos de un conjunto de puntos. Aplicando las oportunas relaciones se deducirá la distribución de las fases y las curvas de isodureza.
- Realización en el laboratorio del tratamiento con láser.
- Medición de la dureza en la zona afectada.

5. Evaluación experimental

- Por último, estableceremos una comparación entre los resultados experimentales y los cálculos hechos con el modelo.

5.2.1 Geometría plana

Por geometría plana entenderemos un volumen definido por planos paralelos con ángulos interiores de 90° y la dimensión z más pequeña que las otras dos.

Búsqueda de los parámetros del proceso

En el temple de un material primeramente hay que establecer los parámetros que nos permitan realizar el proceso térmico descrito anteriormente. Emplearemos una solución analítica para obtener una relación entre la potencia, velocidad relativa haz-probeta, anchura del “spot”, dimensiones de la región acotada por la isoterma T_{Ac3} y la temperatura máxima alcanzada.

Para establecer los parámetros de un proceso concreto hay que tomar algunas decisiones previas:

- La potencia elegida será de 1900 W, quedando margen para subirla si así fuera oportuno (la máxima potencia suministrada por el resonador RS 2000 M es de 2000 W). Hay que subrayar que el coeficiente de absorción es de 51%.
- Una anchura del haz de $\omega = 3$ mm permite tener una amplia región templada.
- Las propiedades del acero F114 se tomaron para una temperatura de 1500 K, que supera ampliamente a $T_{Ac3} = 1338$ K: $\kappa = 34.4$ W m⁻¹K⁻¹, $c = 615$ J kg⁻¹K⁻¹ y $\rho = 7564.1$ kg m⁻³ (Smithells, 1992).

Con estas consideraciones, obtenemos un conjunto de resultados que relacionan la velocidad relativa, la temperatura máxima y las coordenadas de esta (Fig. 5.4).

T_{fusión} = 1723 K				
V (mm/s)	T_{máx} (K)	X_{máx} (mm)	Y_{Ac3} (mm)	Z_{Ac3} (mm)
0	2338.78	-1.803	4.690	2.937
5	1841.71	-2.277	3.087	0.983
10	1542.52	-2.494	2.291	0.396
15	1376.05	-2.613	1.064	0.105
20	1247.47	-2.705	0.000	0.000

Fig. 5.4 Casos particulares para distintos valores de la velocidad. $X_{máx}$ representa la coordenada X , referida al centro del haz, sobre el que la temperatura es máxima. Y_{Ac3} y Z_{Ac3} son las anchuras máximas de la isoterma T_{Ac3} en las direcciones Y e Z

El razonamiento para elegir la velocidad es como sigue:

1. La máxima temperatura para las velocidades de 0 y 5 mm s⁻¹ supera la temperatura de fusión (1723 K) con lo que desestimamos estas dos posibilidades.
2. En los tres casos restantes, la mayor extensión de la región templada se da para una velocidad de 10 mm s⁻¹.

La variable $X_{máx}$ no tiene incidencia en la selección. Esta coordenada que está referida al centro del haz, siendo positiva en el sentido de avance del láser y negativa en caso contrario, resultará importante para determinar el punto hacia donde debe apuntar el pirómetro en la fase experimental de este estudio. A modo de resume, nuestro modelo queda definido por:

Dimensiones:	60×40×10 mm ³
Potencia:	1900 W
Coef. absorción:	51 %
Vel. Relativa:	10 mm s ⁻¹
Anchura del modo (ω):	3 mm
Temperatura inicial:	300 K

Fig. 5.5 Dimensiones de la probeta de acero F114 y parámetros considerados para el proceso de temple.

5. Evaluación experimental

Para acabar este apartado, se debe advertir que el conjunto de dimensiones y parámetros hasta aquí deducidos tendrán validez tanto con el método de los elementos finitos como en el estudio experimental (Fig. 5.6). En este punto se pueden seguir caminos paralelos que convergerían en el instante de comparar y evaluar los resultados, o si así se prefiere, entrar en un proceso de constantes interacciones entre los dos métodos, experimental y numérico.

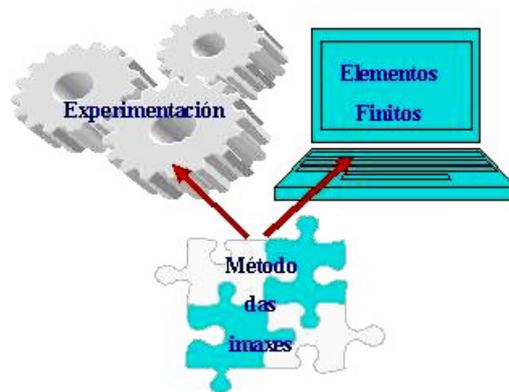


Fig. 5.6 Los datos obtenidos con métodos analíticos se usan tanto con los elementos finitos como en el laboratorio

Aplicación del método de los elementos finitos

Como ya estudiamos la configuración del tamaño y distribución de las discretizaciones espacial y temporal son críticas para conseguir un bajo error en el resultado con el método de los elementos finitos. Basándonos en los análisis hechos en el apartado 4.2.4 se escogió un tipo de malla anisótropa, de dimensiones $1 \times 1 \times 0.1 \text{ mm}^3$ en las proximidades de la superficie iluminada (especulamos con un máximo de 2 mm de profundidad del templado) y $1 \times 1 \times 1 \text{ mm}^3$ en la región apartada, lo que nos permite ahorrar nodos. Para tener una buena calidad de discretización del haz se construyó una malla más densa en la parte central de la superficie. En la gráfica 5.7 está representada la localización del mallado y la región que seleccionamos para su estudio y en 5.8 se pueden ver las dimensiones de los distintos tipos de malla.

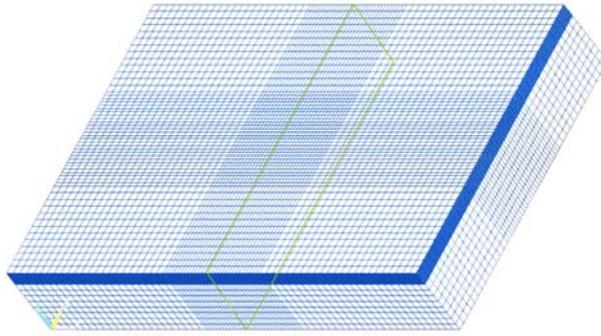


Fig. 5.7 Situación de la malla. En verde destaca la sección seleccionada para su ulterior estudio.

Malla	Dimensiones
Próximo:	$1 \times 1 \times 0.1 \text{ mm}^3$
Lejano:	$1 \times 1 \times 1 \text{ mm}^3$
Haz:	$0.5 \times 0.5 \text{ mm}^2$
Temporal	$9.8 \cdot 10^{-3} \text{ s}$

Fig. 5.8 Dimensiones de las distintas mallas.

Para evaluar en conjunto el error global cometido se hizo una comparación entre la solución aportada por un método analítico y los elementos finitos. Escogiendo los parámetros de la tabla 5.5 (exceptuado la velocidad que se tomó nula) y considerando como constantes las propiedades $\kappa = 24.9 \text{ W m}^{-1}\text{K}^{-1}$, $c = 460.8 \text{ J kg}^{-1}\text{K}^{-1}$ y $\rho = 7850 \text{ kg m}^{-3}$ el error relativo de la temperatura en el centro de la superficie iluminada al cabo de 1 segundo fue de 0.01%. El mismo modelo se empleó para calcular el error introducido por la discretización del haz en movimiento. Para una velocidad de 10 mm s^{-1} aparece una oscilación, que en la región de malla más densa, introduce un error del 0.3% en la máxima temperatura (hay que señalar que el número de Fourier en esta zona es de 3.7). Además, puesto que el método de cálculo es iterativo existe un error debido a la convergencia de la aproximación (ver el apartado 3.3.1.2) que en este estudio fue establecido en 1%, tanto para las variaciones en la temperatura como en el flujo calorífico.

En total el modelo numérico consta de 119.625 nodos distribuidos por 111.888 elementos. El método de resolución empleado fue el del gradiente conjugado de Jacobi.

Para el tratamiento el centro del haz láser se situó inicialmente en la mitad de la arista Y de modo que su velocidad v en la dirección OX^+ lo llevó hasta el medio del borde paralelo (Fig. 5.9).

El material empleado para construir la probeta es un acero martensítico con denominaciones, entre otras, AISI 1045, F114, 06A42 o EN 8. Su composición es de

5. Evaluación experimental

0.42% de carbono, 0.64% de manganeso y 98.94% de hierro (*Smithells, 1992*). Las gráficas 5.10 muestran la dependencia con la temperatura de las tres propiedades térmicas: densidad, capacidad calorífica y conductividad térmica.

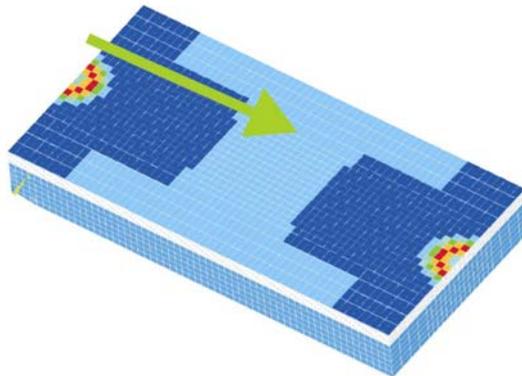


Fig. 5.9 El láser comenzó en la mitad del eje Y moviéndose paralelamente a X hasta alcanzar el borde de la pieza

Hay que destacar que en las tres representaciones gráficas (*Fig. 5.10*) la presencia del punto correspondiente a una temperatura de 2000 K, que es ficticio, se justifica como una necesidad para que el programa de elementos finitos mantenga la precisión deseada fuera del rango en el que están definidas las propiedades térmicas.

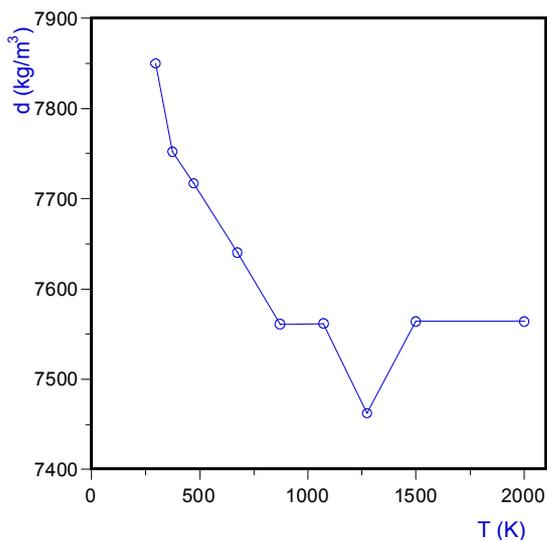


Fig. 5.10(a) Densidad del acero AISI 1000 en función de la temperatura.

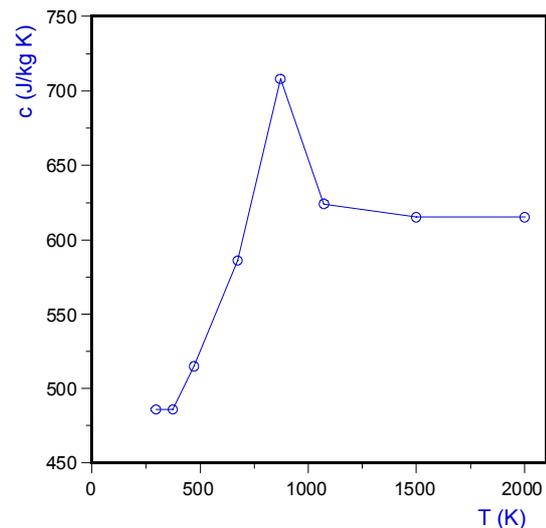


Fig. 5.10(b) Capacidad calorífica del acero AISI 1000 en función de la temperatura.

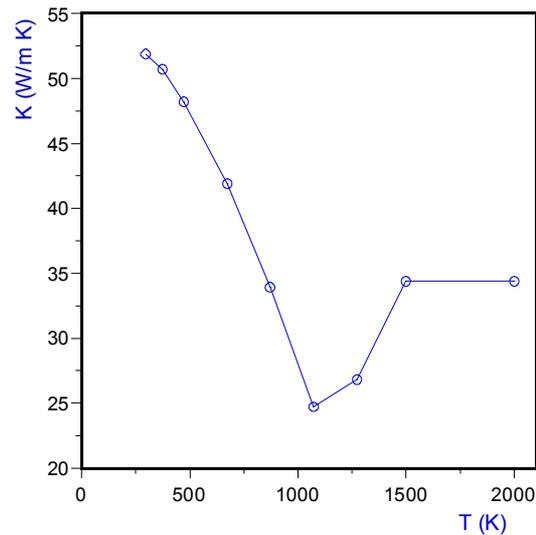


Fig. 5.10(c) Conductividad térmica del acero AISI 1000 en función de la temperatura.

En la figura 5.11 se ve como evolucionan las temperaturas T_{Ac1} (inicio de la transformación de la perlita en austenita) y T_{Ac3} (inicio de la transformación de la ferrita en austenita) con la velocidad de calentamiento del material (Sanesteban, 2002).

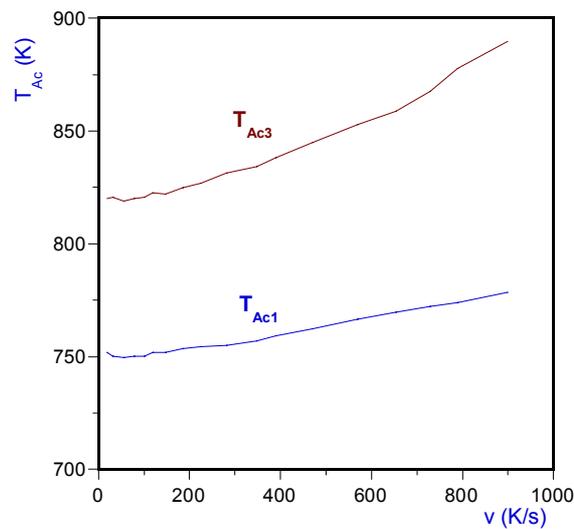


Fig. 5.11 Temperaturas de transformación de fase T_{Ac1} y T_{Ac3} en función de la velocidad de calentamiento.

Resultados de los cálculos y de las medidas

Para su estudio se eligió una sección de $40 \times 10 \text{ mm}^2$ sobre el plano $x = 30 \text{ mm}$. Al ser perpendicular a la dirección de movimiento del haz, del análisis del tratamiento se

5. Evaluación experimental

sacará información tanto de la anchura del temple como de su profundidad. La selección del plano en la mitad de la dimensión X es una garantía de que se alcanza el régimen estacionario y no aparecen efectos de borde (*Fig. 5.12*).

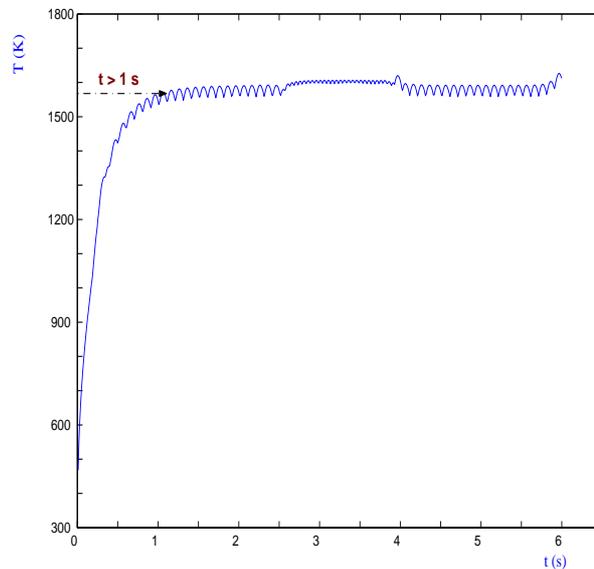


Fig. 5.12 Máxima temperatura frente al tiempo. El estado estacionario se alcanza en tiempos ligeramente superiores a 1 s.

Las oscilaciones de la temperatura máxima estacionaria (en los nodos) aparecen por el efecto que tiene la malla sobre la discretización del haz en movimiento. Para la región reticulada con malla gruesa el período de estas fluctuaciones es de 0.1 s y 0.05 s en la discretización fina.

Las siguientes figuras están obtenidas con el programa de elementos finitos ANSYSTM. En 5.13 y 5.14 se representan los planos XY (la superficie iluminada) y XZ ($y = 20$ mm) después del tratamiento. En rojo y para cuatro tiempos diferentes (1.96, 3, 3.92 y 4.9 segundos) se representan las zonas que superaron la temperatura T_{Ac3} ; las líneas negras delimitan la extensión que define la superposición de estas regiones.

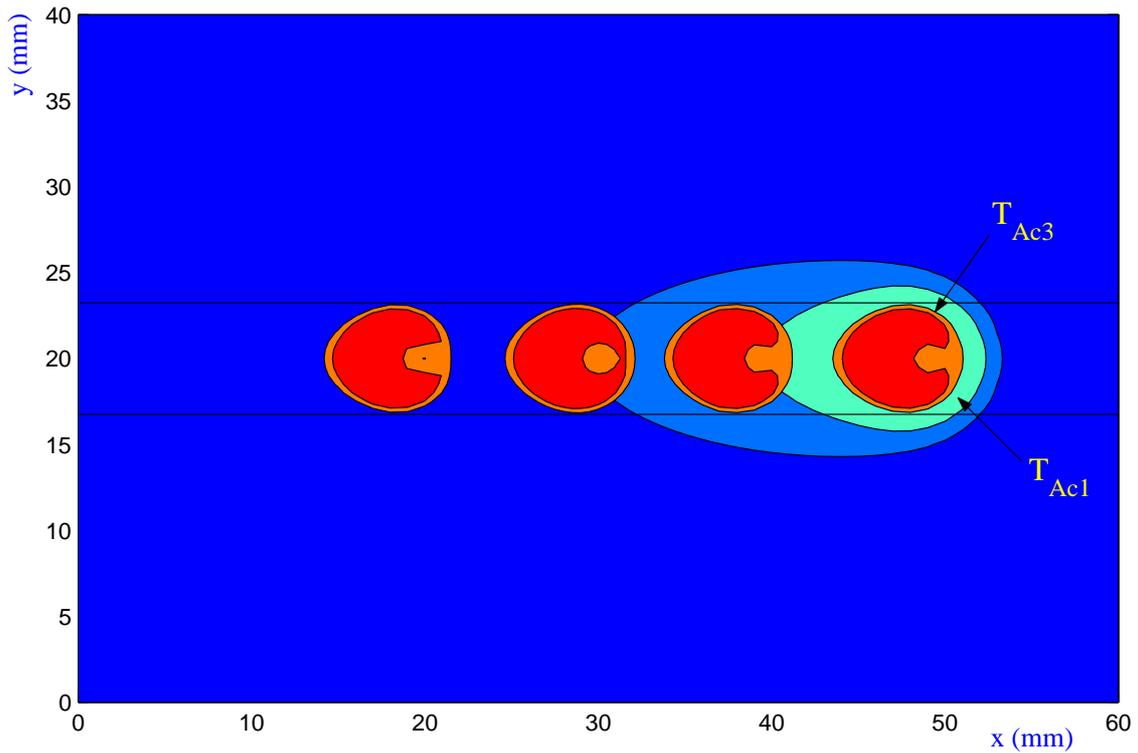


Fig. 5.13 Istotermas en el plano XY para cuatro instantes. Las líneas rectas delimitan la región que hipotéticamente será templada.

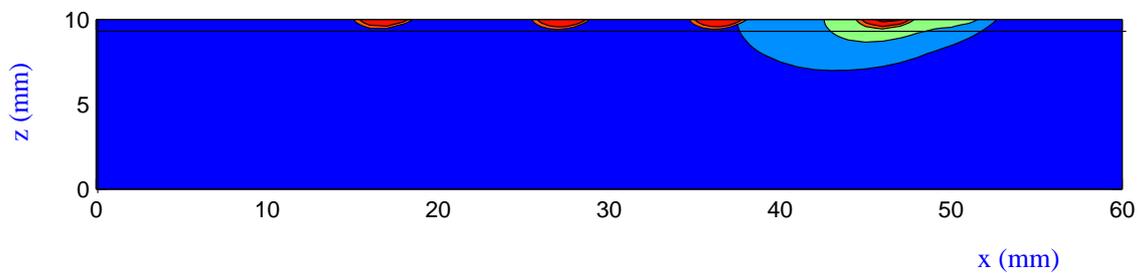


Fig. 5.14 Istotermas en el plano XZ para cuatro instantes. La línea recta delimita la máxima profundidad que hipotéticamente será templada.

En 5.15 se ve como evoluciona la temperaturas con el tiempo en la vertical del centro de la superficie iluminada a intervalos de 0.1 (los dos primeros milímetros) y 1 mm en la dirección Z.

5. Evaluación experimental

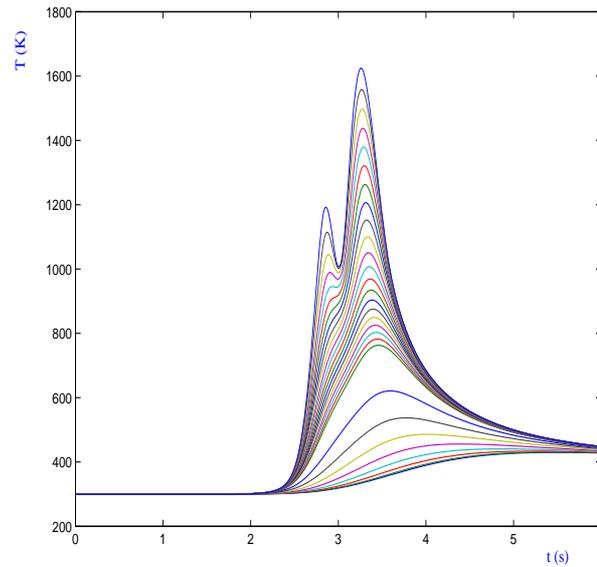


Fig. 5.15 Distribución de las temperaturas sobre el centro de la probeta a distintas profundidades.

En las gráficas 5.16 se representan: (a) los mapas de máximas temperaturas sobre un fragmento de la sección de la probeta, (b) y (c) los perfiles de la temperatura máxima en la superficie y en el centro de la probeta respectivamente. En estas figuras el origen de coordenadas se situó sobre el centro del haz.

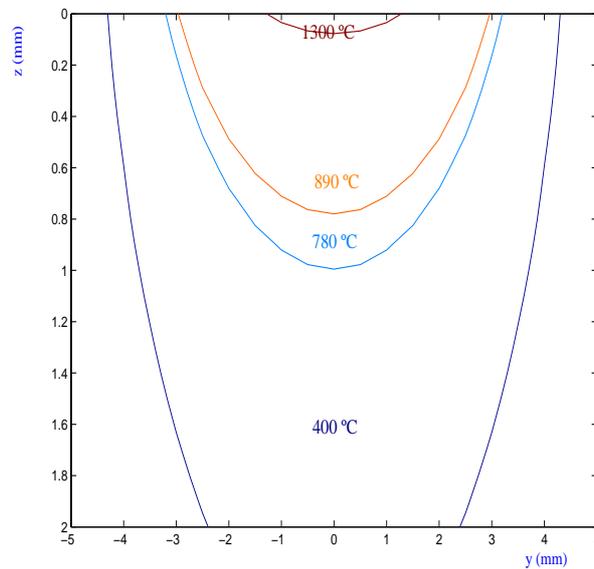


Fig. 5.16 (a) Mapa de temperaturas en la sección estudiada.

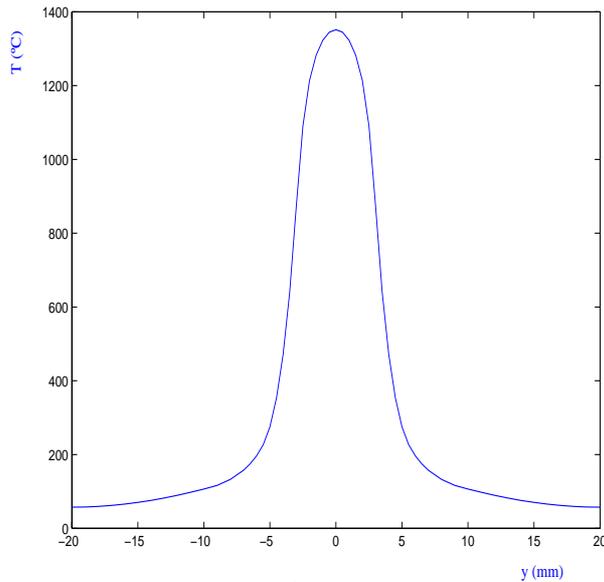


Fig. 5.16 (b) Perfil de la temperatura máxima en la superficie de la probeta.

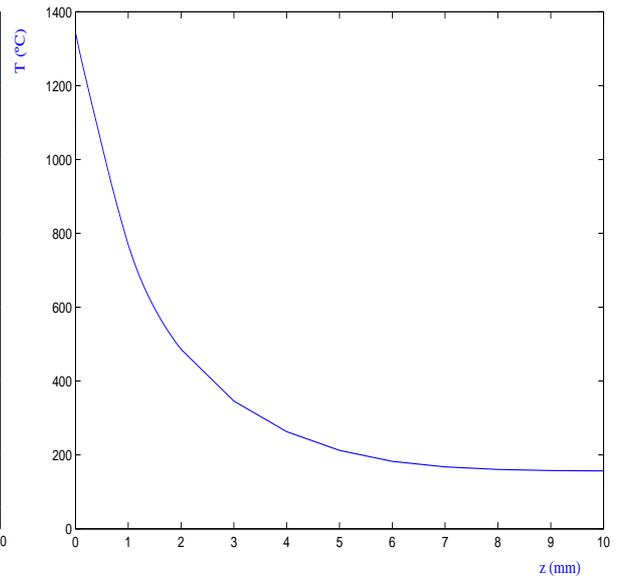


Fig. 5.16 (c) Perfil de la temperatura máxima en el centro de la probeta frente a la profundidad.

Las figuras 5.17 muestran: (a) un mapa de la concentración de austenita al final del calentamiento, (b) y (c) los perfiles de la concentración en la superficie y en el centro de la geometría.

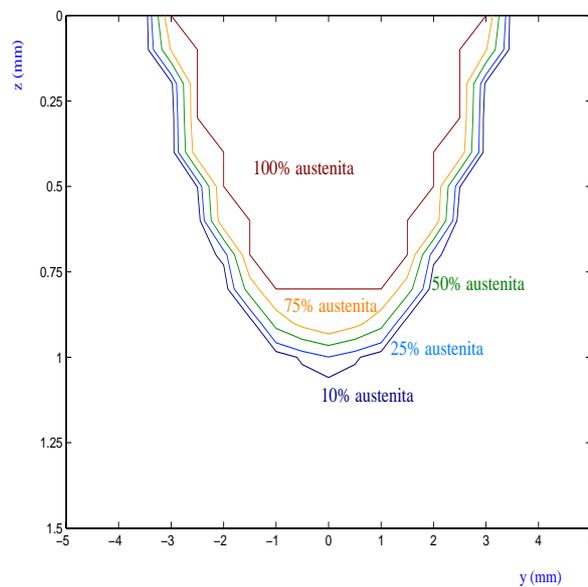


Fig. 5.17 (a) Distribución de la concentración de austenita al final del calentamiento

5. Evaluación experimental

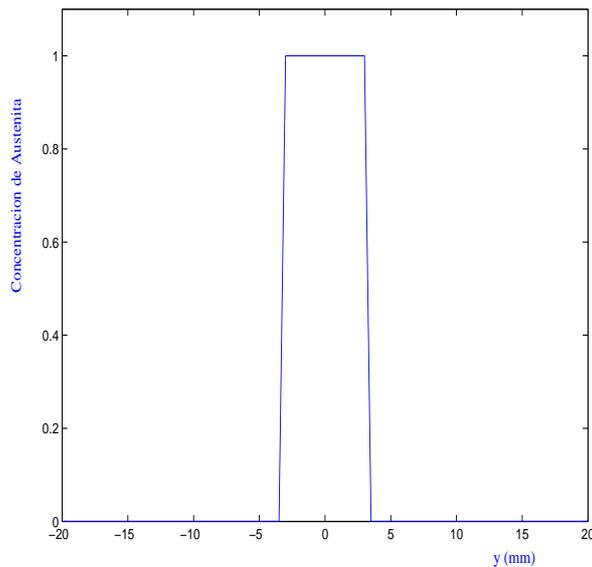


Fig. 5.17 (b) Perfil de la concentración de austenita en la superficie de la probeta.

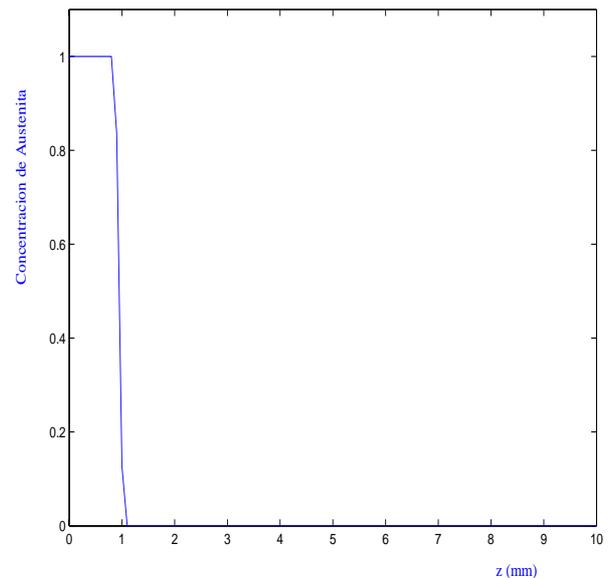


Fig. 5.17 (c) Perfil de la concentración de austenita en el centro de la probeta.

El siguiente paso a dar consiste en la consecución de un mapa de distribución de la martensita a partir de los ciclos térmicos. Un mapa y los perfiles de la concentración están representados en las gráficas 5.18 (a), (b) y (c). Las distintas líneas separan regiones con el mismo grado de composición: la línea roja oscura contiene el 90% de martensita, la naranja el 75% y así hasta la línea azul marino con una composición del 10%. Para completar el proceso de formación de la martensita se estimó con un simple cálculo que la temperatura final de la muestra fue de 367 K (despreciando las pérdidas por convección, radiación y el efecto del ambiente).

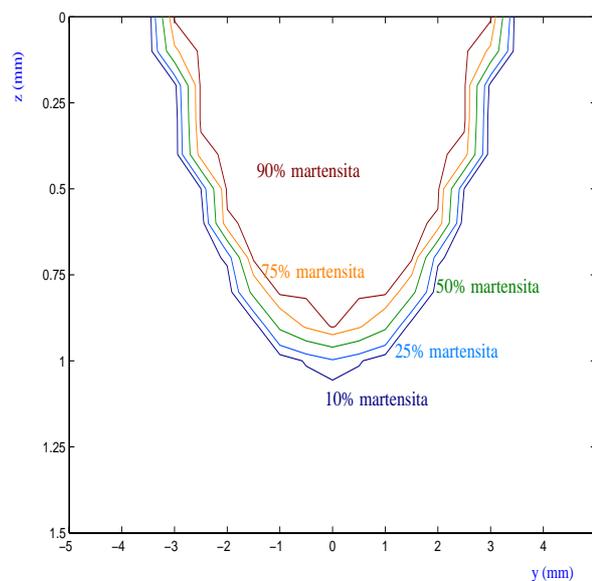


Fig. 5.18 (a) Mapa de la concentración de martensita en una sección. Las líneas están distribuidas entre la roja (90% de martensita) y la azul (10%).

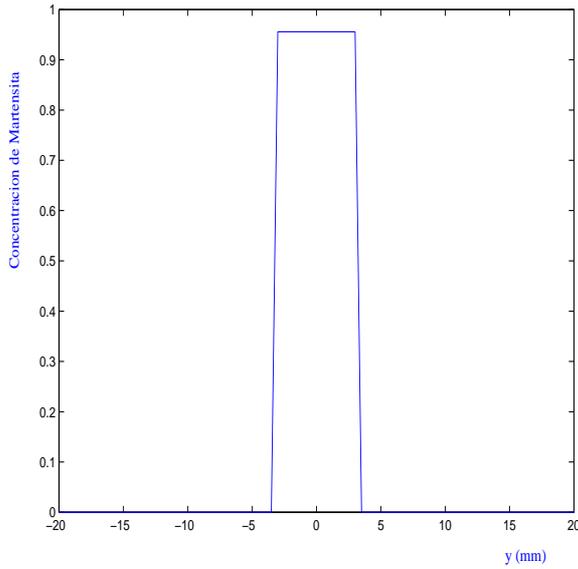


Fig. 5.18 (b) Perfil de la concentración de martensita en la superficie de la probeta.

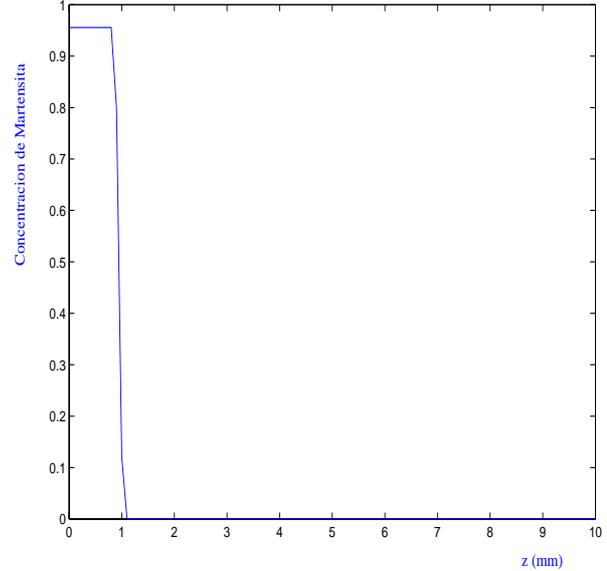


Fig. 5.18 (c) Perfil de la concentración de martensita frente a la profundidad en el centro de la probeta.

En la gráfica 5.19(a) se puede ver el mapa de dureza resultante de aplicar estas relaciones al mapa de concentraciones de las fases para una mitad de la sección temperada. Las curvas que separan regiones de igual dureza van de 400 Hv, en rojo, a 300 Hv, en azul marino. Se aprecia que las dimensiones de la zona tratada, que consideraremos aquélla que tiene una dureza igual o mayor de 300 Hv, son de aproximadamente 6.8 mm de ancho y 1.06 mm de profundidad. La máxima dureza es de 820 Hv.

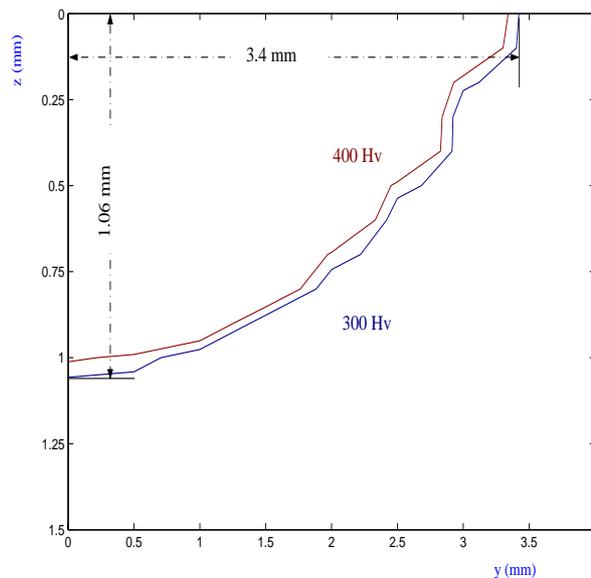


Fig. 5.19 (a) Mapa de durezas de una mitad de la sección tratada. La dureza del material base está entre 200 y 250 Hv.

5. Evaluación experimental

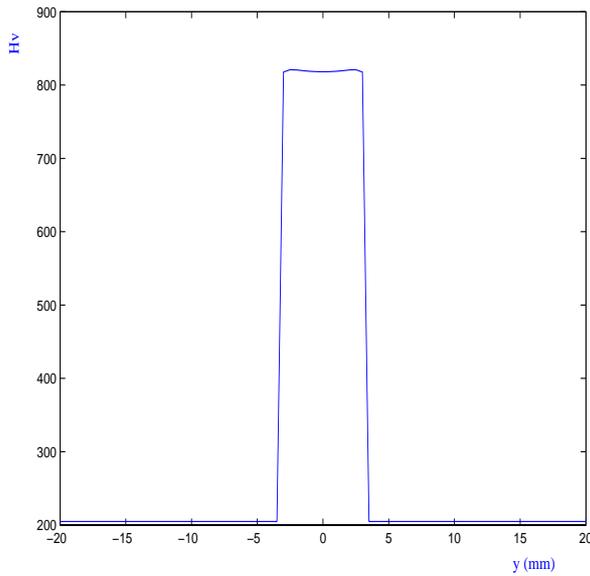


Fig. 5.19 (b) Perfil de la dureza en la superficie de la probeta.

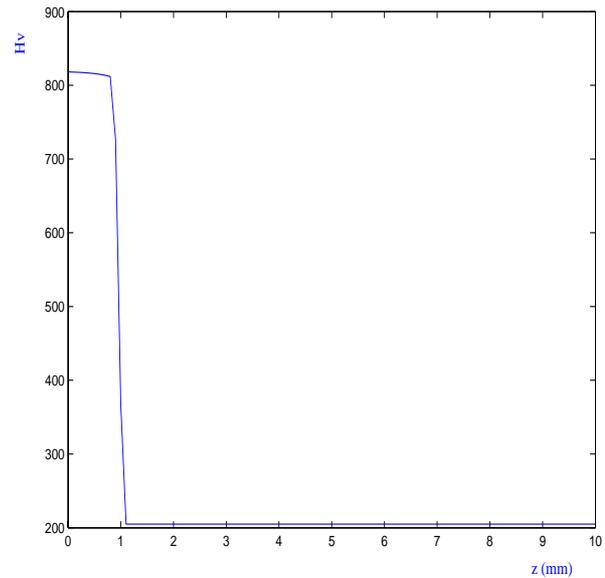


Fig. 5.19 (c) Perfil de la dureza en el centro de la probeta.

El uso del análisis dimensional hecho en el apartado 4.1.3 nos permitirá estimar la incertidumbre de los cálculos.

En [5.10] se agrupan los errores introducidos por la malla (0.01%), la discretización de la velocidad (0.3%) y los debidos a las oscilaciones experimentales en los tres parámetros del proceso: velocidad, potencia y anchura del haz. Conviene especificar que en el caso de la potencia la incertidumbre experimental está en el 1%, así que se tomó el error del coeficiente de absorción (2%). El error total se calculó como la raíz cuadrada de la suma de los cuadrados.

Malla:	0.01% T_{\max}
Discretización de la velocidad:	0.30% T_{\max}
Velocidad: $\pm 3\%$	1.00% T_{\max}
Potencia (coef. abs.): $\pm 2\%$	2.00% T_{\max}
Anchura (ω): $\pm 5.4\%$	7.40% T_{\max}
Total	8.00% T_{\max}

[5.10]

Asumiremos que para pequeñas variaciones de los parámetros los ciclos térmicos se podrán amplificar y disminuir proporcionalmente al valor del error total de la temperatura máxima. Aplicaremos estos cambios a los ciclos térmicos y al cálculo de la distribución de las fases y de la dureza. Además será necesario adaptar las dimensiones de la geometría ampliándola en un factor 1.054 en el caso de que la temperatura máxima

sea $0.92 T_{\max}$ o comprimiéndola un 0.946 cuando la temperatura sea $1.08 T_{\max}$. Así el error de la anchura calculada es de ± 0.3 mm y el de la profundidad de ± 0.09 mm.

Los resultados de las mediciones experimentales se representan en la tabla (en horizontal la profundidad y en vertical la anchura):

<i>mm</i>	0.1	0.2	0.3	0.4	0.5	0.6	0.7	0.8	0.9	1.
0.1	735	801	791	578	471	454	610	262	209	216
0.2	548	591	500	708	490	578	417	287	234	215
0.3	631	646	638	638	717	743	531	296	246	236
0.4	735	610	684	660	743	500	653	287	239	233
0.5	653	526	591	437	554	610	388	262	214	212
0.6	772	638	624	584	735	441	399	305	205	214
0.7	753	692	772	510	610	653	708	285	251	236
0.8	717	762	735	610	429	572	368	291	236	238
0.9	700	653	476	391	421	375	445	228	215	212
1.	684	604	772	762	429	700	388	255	218	222
1.1	762	668	708	449	700	317	480	239	239	218
1.2	772	762	572	726	312	350	218	221	239	205
1.3	692	684	505	624	454	371	631	231	238	209
1.4	717	572	554	624	490	490	320	241	225	225
1.5	684	676	476	537	467	668	371	222	236	225
1.6	726	692	441	520	660	317	238	225	236	212
1.7	743	762	717	437	500	572	233	236	216	216
1.8	801	668	708	560	753	261	227	224	211	228
1.9	624	684	772	676	365	402	231	221	209	209
2	726	604	762	542	356	251	225	218	208	214
2.1	692	822	653	429	515	239	214	227	221	209
2.2	505	449	531	433	341	222	212	198	221	219
2.3	684	421	735	395	239	219	215	207	212	201
2.4	700	676	505	347	228	222	204	209	201	227
2.5	485	684	490	227	241	228	236	227	224	208
2.6	726	449	425	205	204	205	203	201	194	203
2.7	726	604	262	215	228	208	219	211	224	203
2.8	490	445	218	221	227	208	196	225	194	216
2.9	333	239	231	233	227	208	211	231	190	207
3.	230	231	225	222	222	212	224	207	208	216

Tab. 5.20 Resultados de las medidas experimentales. En horizontal la variación con la profundidad y en vertical con la anchura.

5. Evaluación experimental

En la fotografía 5.21 se ve el resultado del tratamiento en el laboratorio. La línea roja separa la predicción hecha con el modelo.

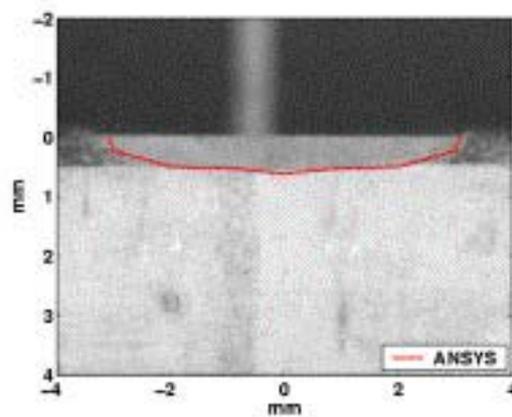


Fig. 5.21 Fotografía de un fragmento de la región tratada.

Los La dureza del material base está entre 200-250 Hv siendo e l máximo valor alcanzado de 801 Hv. El mapa de durezas 5.22(a) presenta unas dimensiones de 5.8 mm de ancho en la superficie y 0.8 mm de profundidad máxima para o valor de 300 Hv. En 5.22 (b) y (c) se pueden ver los perfiles de dureza en la superficie y en el centro de la probeta en los que se observan fluctuaciones de un punto a otro de, aproximadamente, 100 Hv alrededor de un valor medio.

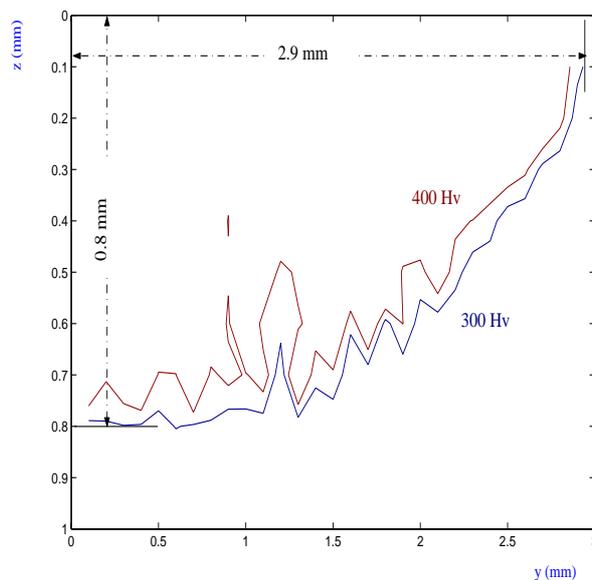


Fig. 5.22 (a) Mapa de dureza y dimensiones de una mitad de la probeta obtenida experimentalmente.

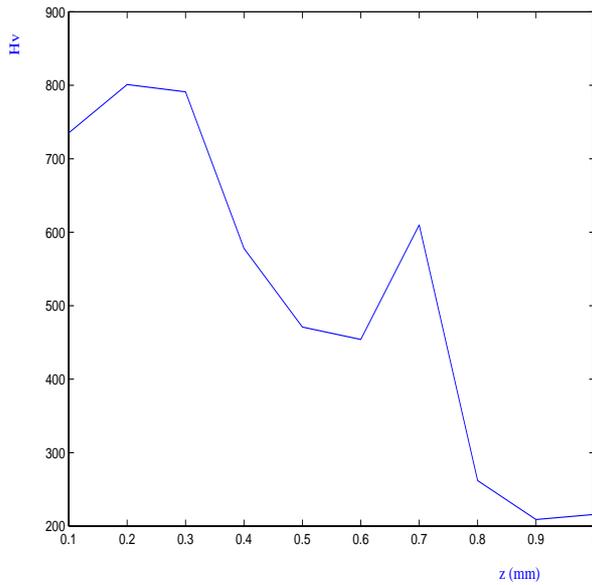


Fig. 5.22 (b) Perfil de la dureza en el centro de la pieza.

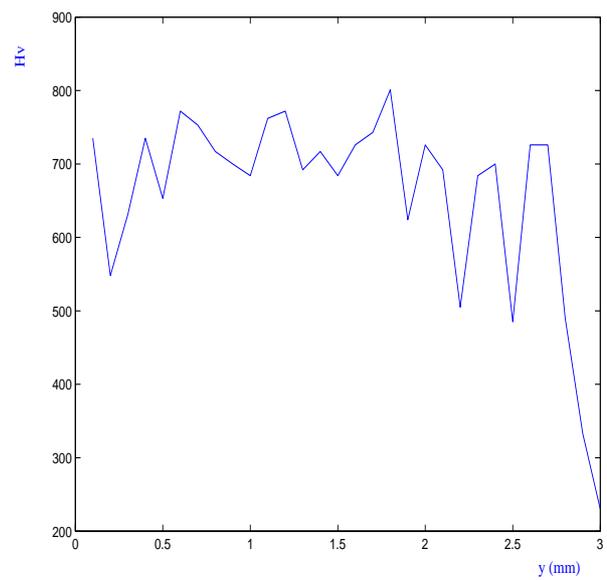


Fig. 5.22 (c) Perfil de la dureza en la superficie de una mitad de la pieza.

Comparación entre los cálculos y las medidas

Seguidamente se presenta la compilación de los resultados obtenidos, tanto numérica como experimentalmente.

	Calculado	Medido	Diferencia
Ancho máx.	6.8 ± 0.17 mm	5.8 mm	1. mm
Profundidad máx.	1.06 ± 0.085 mm	0.8 mm	0.26 mm

[5.11]

El análisis de estos datos nos indica que el modelo tiene un buen funcionamiento para la predicción tanto de la anchura máxima como de la profundidad del tratamiento. De entre estas dos comparaciones la mejor estimación es la del ancho con un error relativo del 17%, mientras que la penetración del temple se aproxima en un 32%. Hay que señalar la presencia de fuertes oscilaciones en los perfiles experimentales de las curvas de isodureza 300 Hv y 400 Hv que suponemos que son debidos a fuertes variaciones locales de las propiedades del acero.

En 5.23 se ve una representación gráfica del perfil de dureza en diferentes anchuras a partir del centro de la probeta (curva 0). El análisis de la divergencia entre las curvas de dureza calculada y la medida, aporta información cualitativa del rango de aplicabilidad del modelo. A diferencia de los otros dos parámetros, que son estimaciones de la extensión de una región, el perfil de dureza se saca de una medición puntual; entonces

5. Evaluación experimental

en su determinación son relevantes las imperfecciones microscópicas locales (máculas de martensita revenida, dislocaciones en la red cristalina,...), inhomogeneidades que no se consideran en el modelo de elementos finitos.

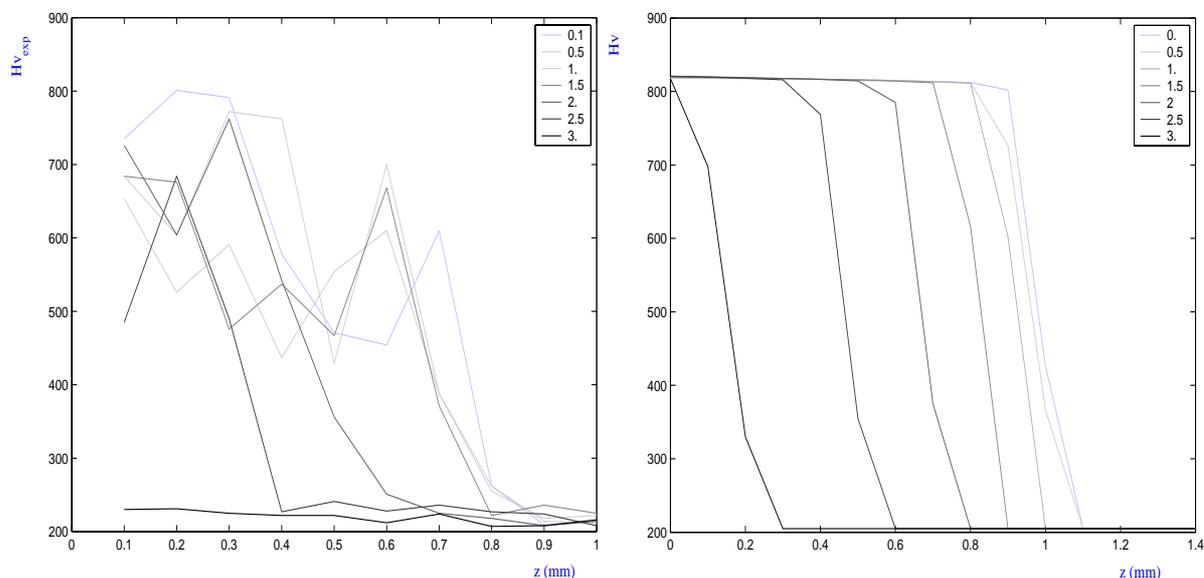


Fig. 5.23 Dureza medida y calculada frente a la profundidad.

5.2.2 Geometría cilíndrica

Por geometría cilíndrica entenderemos una pieza cilíndrica con un hueco, también cilíndrico, situado en la dirección del eje de simetría.

Búsqueda de los parámetros del proceso

Aplicando el mismo proceder que en el anterior apartado y puesto que los resultados se calcularon con independencia de las dimensiones de la probeta, los parámetros seleccionados para el temple serán exactamente los mismos. En figura 5.24 se pueden consultar tanto las dimensiones de la probeta, como los parámetros del proceso elegidos.

Potencia:	1700 W
Coef. absorción:	57 %
Vel. relativa:	10 mm s ⁻¹
Anchura del modo (ω):	3 mm
Temperatura inicial:	300 K

Fig. 5.24 Parámetros del proceso.

Aplicación del método de los elementos finitos

Estudios previos realizados nos demostraron que los resultados de las simulaciones con elementos finitos son independientes del tamaño del arco del cilindro que consideremos, siempre y cuando éste sea lo suficientemente extenso como para evitar los efectos de borde. En la gráfica 5.25 se representan los ciclos térmicos de un punto con las mismas coordenadas en cinco geometrías diferentes.

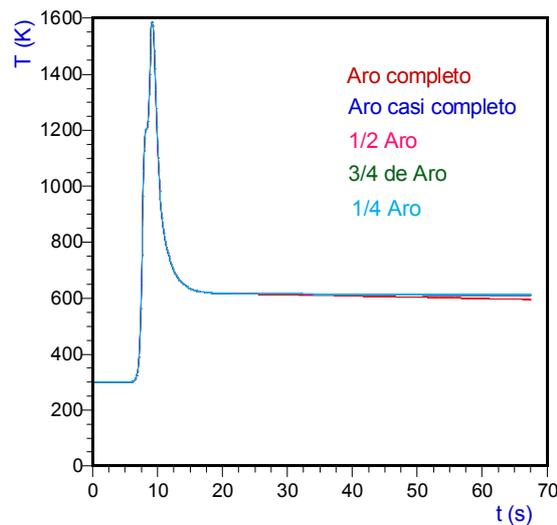


Fig. 5.25 Ciclos térmicos para la misma coordenada en cinco simulaciones diferentes.

Concluimos entonces, que en las simulaciones podemos sustituir un cilindro por un arco sin que se produzcan errores apreciables pero con el efecto beneficioso de disminuir el número de elementos del modelo. Así construimos una probeta de dimensiones:

Dimensiones	
Radio interior:	12.5 mm
Radio Exterior:	20.5 mm
Longitud exterior:	60 mm
Ancho:	30 mm
Grosor:	8 mm

Fig. 5.26 Dimensiones de la probeta

5. Evaluación experimental

Escogiendo el mismo modelo de red que en el anterior apartado (ver en *Fig. 5.8* los errores que introducen cada una de las distintas redes). En la gráfica 5.27 se puede ver la localización del mallado. Como la curvatura de los elementos no introduce ningún error significativo la incertidumbre global que aporta la malla es idéntica al anterior caso, 0.01% (ver o apartado 4.2.4).

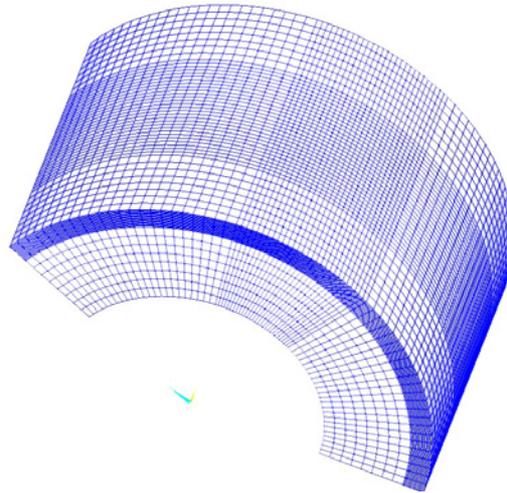


Fig. 5.27 La malla se hizo más densa en el centro y en las proximidades de la superficie.

En total, el modelo consta de 91.125 nodos y 84.656 elementos y el método de resolución empleado fue el del gradiente conjugado de Jacobi.

Al igual que en el anterior tratamiento el haz comenzó con su centro en la mitad de la arista en Y desplazándose con velocidad v en la dirección OX^+ hasta alcanzar el borde paralelo.

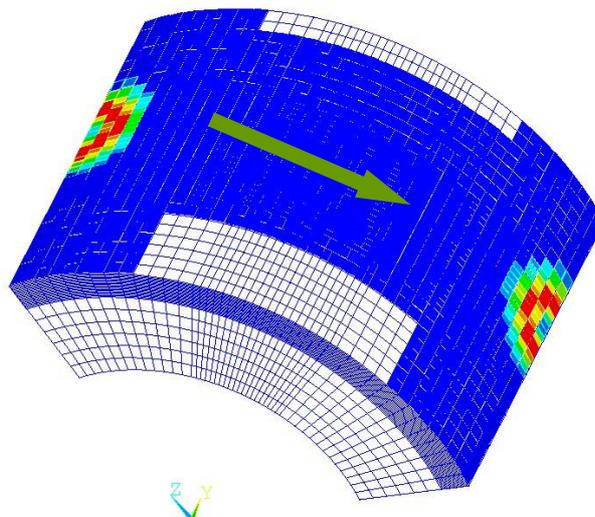


Fig. 5.28 El haz se mueve con velocidad v desde la mitad de la arista Y hasta alcanzar el otro borde.

El material empleado, acero F114, posee las mismas propiedades térmicas que en el anterior apartado.

Resultados de los cálculos y de las medidas

Análogamente al anterior estudio, se tomó una sección paralela al eje de simetría del aro ($30 \times 8 \text{ mm}^2$) para su análisis. En las gráficas 5.29 y 5.30 se aprecia la distribución de las isotermas resultado de la simulación numérica con elementos finitos. Las líneas negras delimitan la región que hipotéticamente quedará afectada por el endurecimiento.

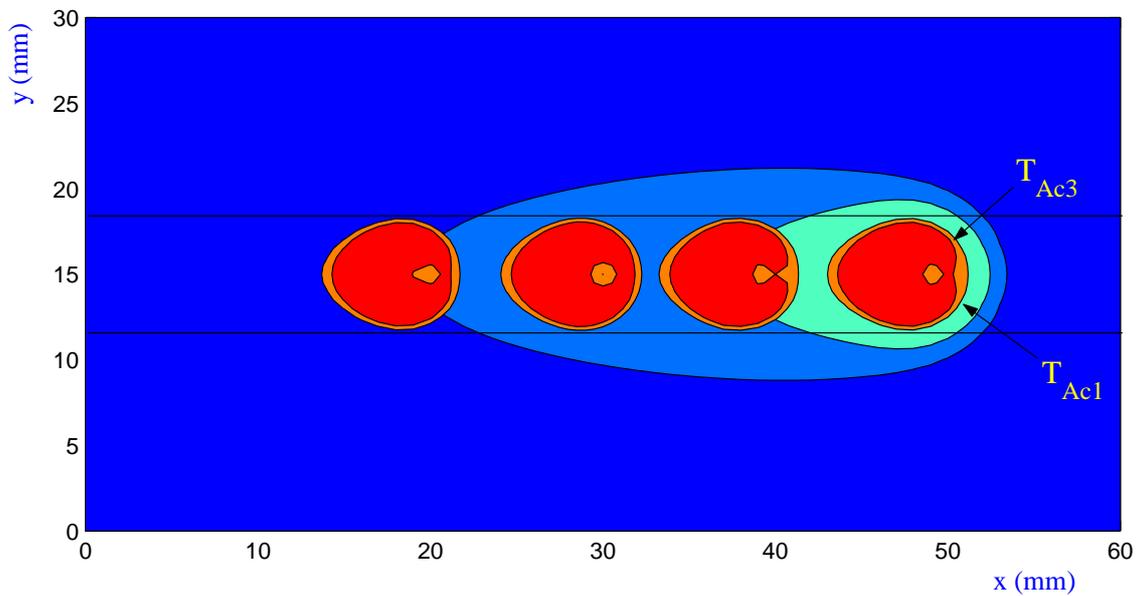


Fig. 5.29 Distribución de isotermas en el plano XY

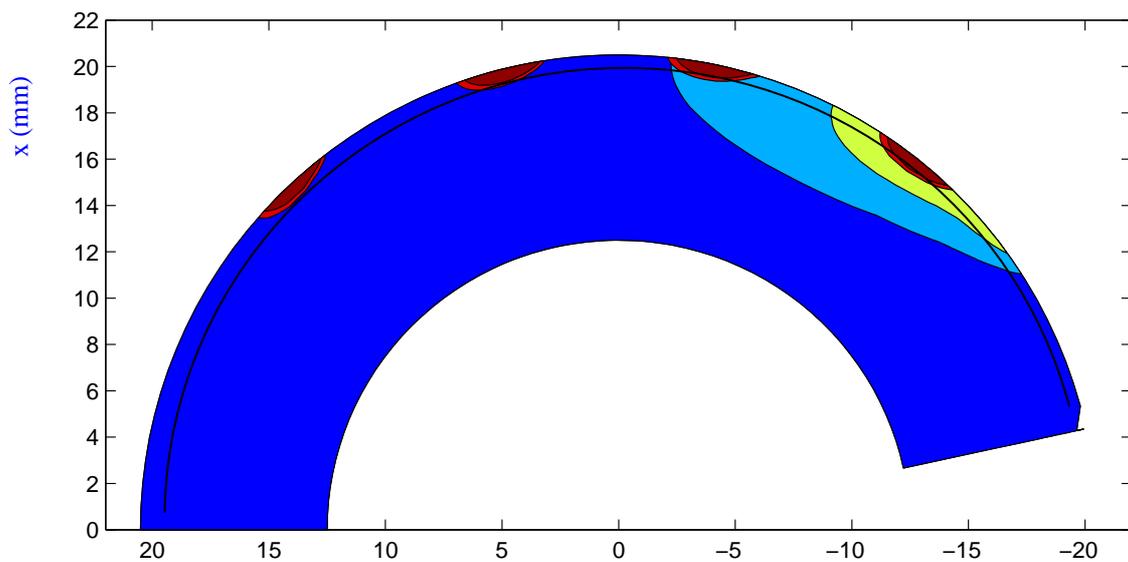


Fig. 5.30 Distribución de isotermas en el plano XZ z (mm)

5. Evaluación experimental

La figura 5.31, obtenida con el programa de elementos finitos ANSYSTM, representa como evoluciona la temperaturas con el tiempo durante el tratamiento. En esta gráfica las distintas curvas están tomadas a intervalos de 0.1 (los 2 primeros milímetros) y 1 mm en la dirección z , en el centro de la superficie iluminada.

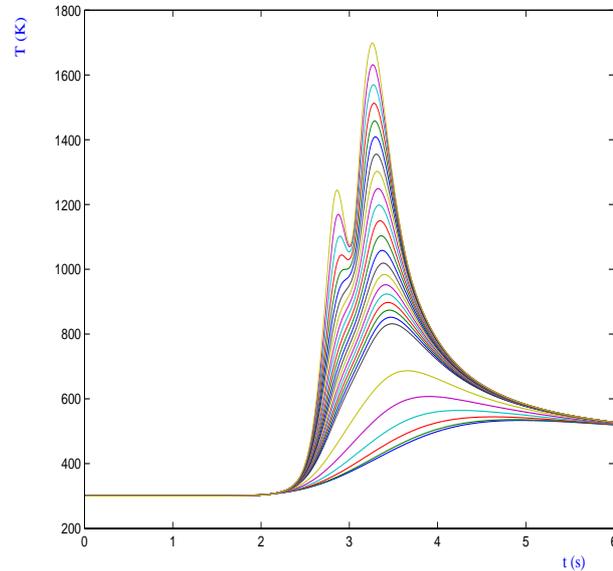


Fig. 5.31 Distribución de la temperatura en función del tiempo sobre el centro de la probeta. Las curvas están tomadas a intervalos de 0.1 (las veinte primeras) y 1 mm.

En 5.32 (a) se representan un fragmento de un mapa de temperatura en la sección de la probeta seleccionada para su estudio, el origen de coordenadas se situó en la vertical del centro del haz. En 5.32 (b) y (c) aparecen los perfiles de la temperatura máxima.

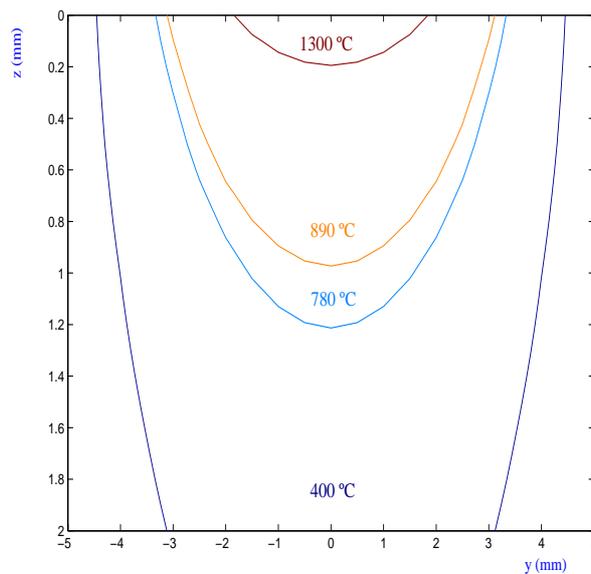


Fig. 5.32 (a) Mapa de temperaturas.

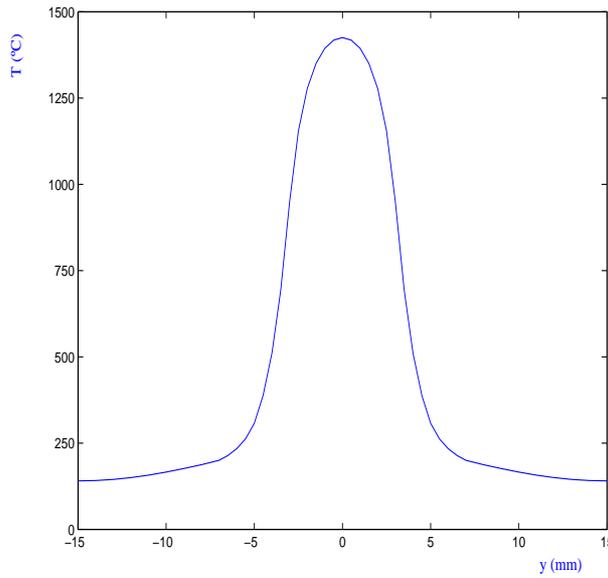


Fig. 5.32 (b) Perfil de la temperatura en la superficie de la probeta.

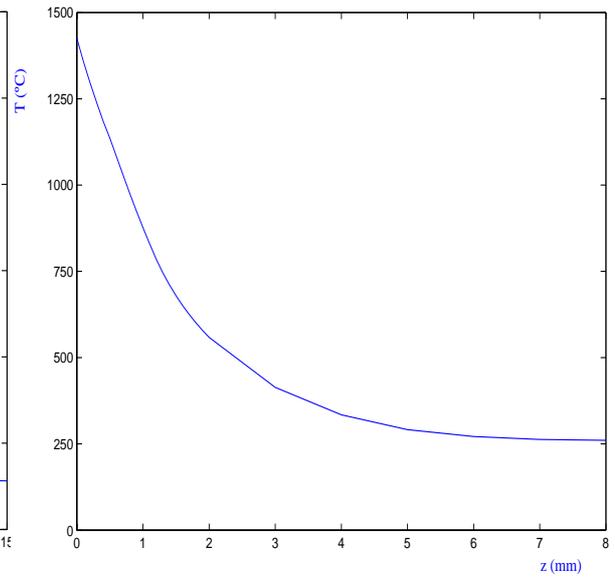


Fig. 5.32 (c) Perfil de la temperatura en el centro de la probeta.

En las gráficas 5.33 se ve como queda distribuida la fase austenítica durante el calentamiento.

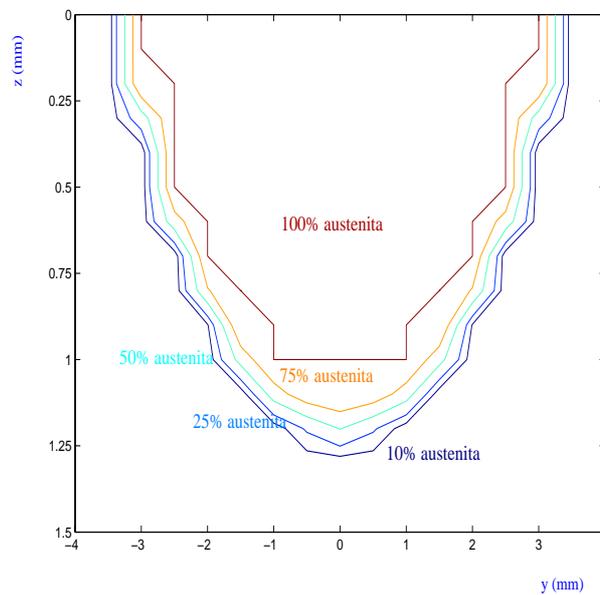


Fig. 5.33 (a) Mapa de concentración de la fase austenita. Las líneas unen puntos con el mismo porcentaje.

5. Evaluación experimental

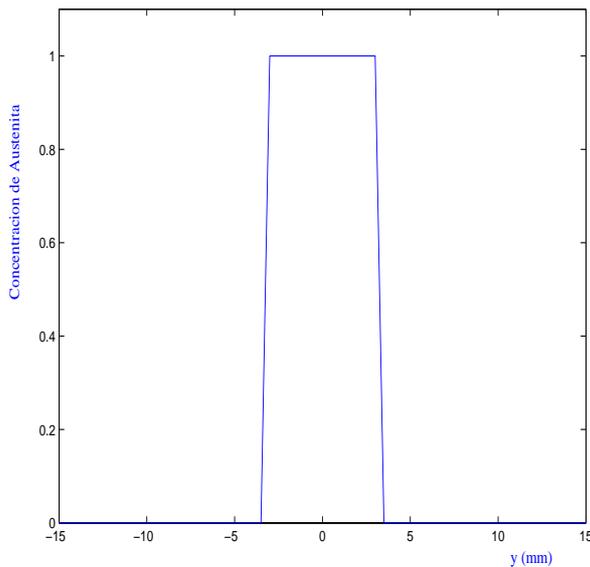


Fig. 5.33 (b) Perfil de la concentración de austenita en la superficie.

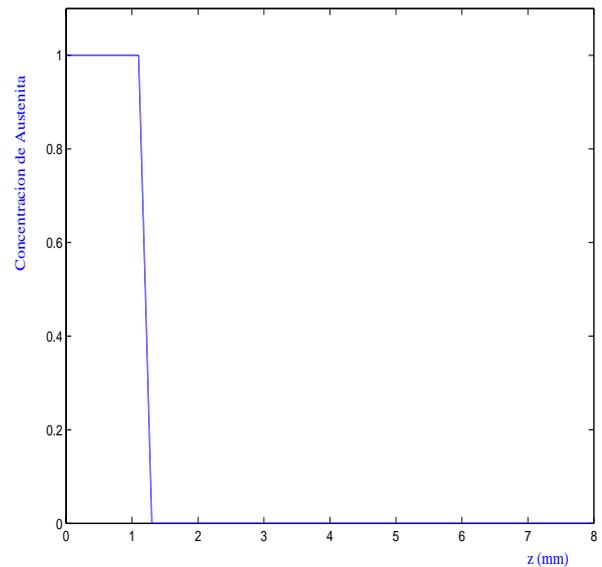


Fig. 5.33 (c) Perfil de la concentración de austenita en el centro de la probeta.

Un mapa de distribución de la martensita que se corresponde con un fragmento de la sección tratada ($10 \times 2 \text{ mm}^2$) está representado en la gráfica 5.34(a). Las líneas separan regiones con distinta composición de martensita: desde 90% en rojo, hasta el 10% en azul. En 5.34 (b) y (c) se ven los perfiles de la concentración de martensita tanto en la superficie como en el centro de la probeta. Para completar el proceso de formación de la martensita se estimó con un simple cálculo que la temperatura final de la muestra fue de 411.7 K (despreciando las pérdidas por convección, radiación y el efecto del ambiente).

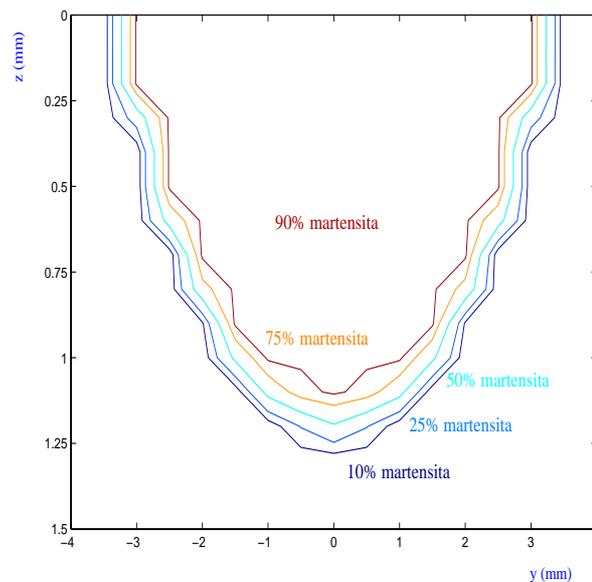


Fig. 5.34 (a) Mapa de concentración de la fase martensítica. Las líneas separan regiones que contienen distintos porcentajes de martensita.

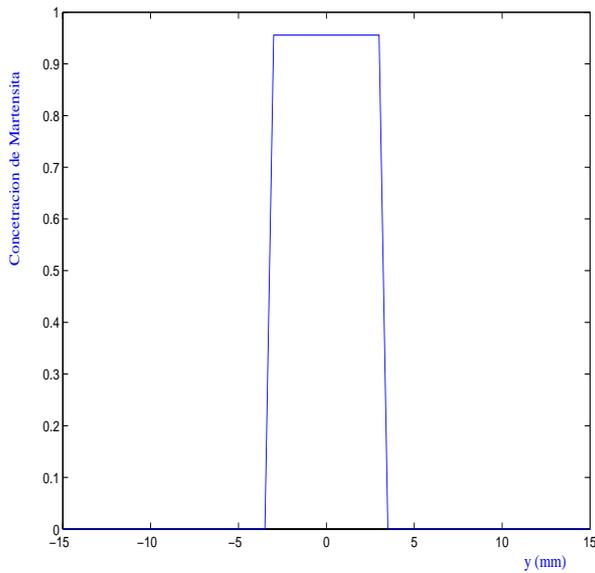


Fig. 5.34 (b) Perfil de la concentración de martensita en la superficie.

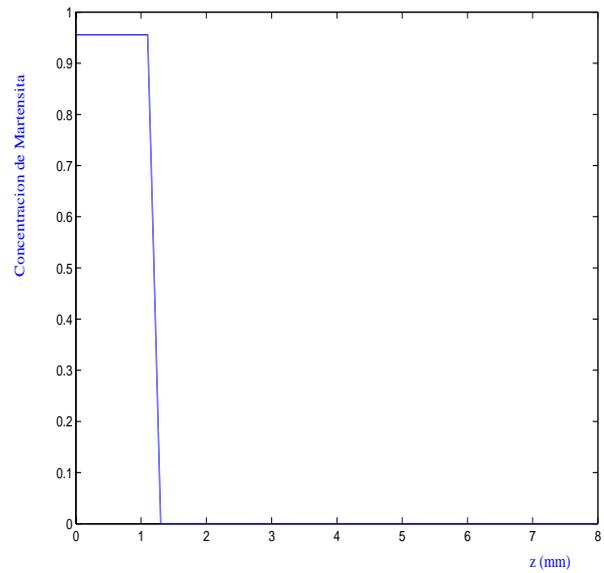


Fig. 5.34 (c) Perfil de la concentración de martensita en el centro de la probeta.

En las gráficas 5.35 se pueden ver un mapa de dureza resultante y los perfiles en la superficie y en el centro de la geometría. Se aprecia que las dimensiones de la zona tratada, la que tiene una dureza igual o mayor de 300 Hv, son de aproximadamente 6.8 mm de ancho y 1.25 mm de profundidad. La máxima dureza se alcanza en la superficie con un valor de 793 Hv.

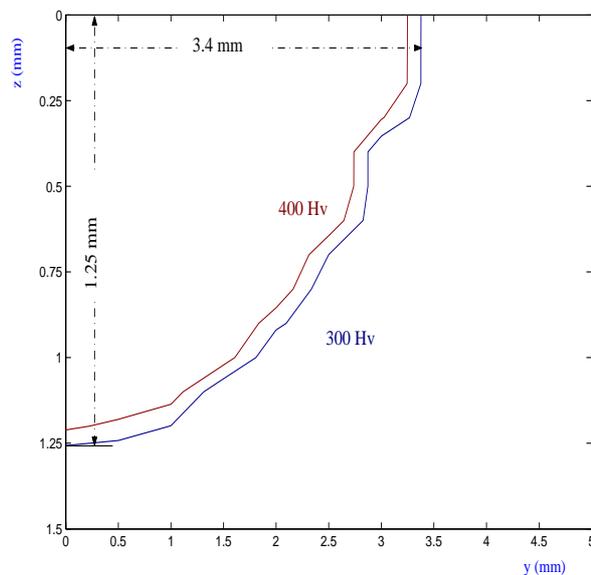


Fig. 5.35 (a) Curvas de isodureza, separadas a intervalos de 100 Hv, de una mitad de la sección tratada.

5. Evaluación experimental

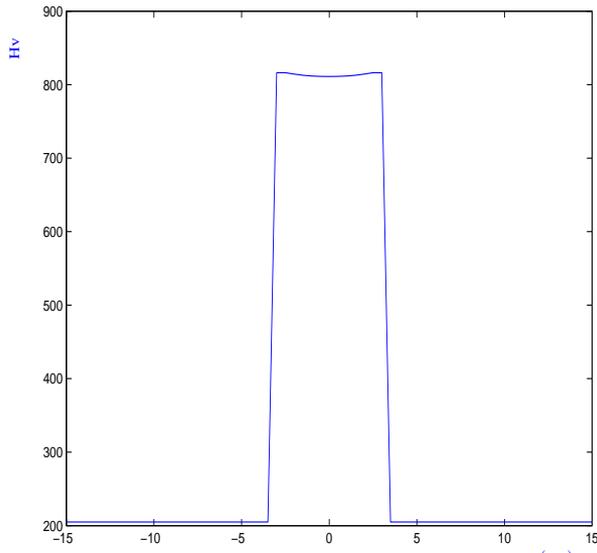


Fig. 5.35 (c) Perfil de la dureza calculada en la superficie.

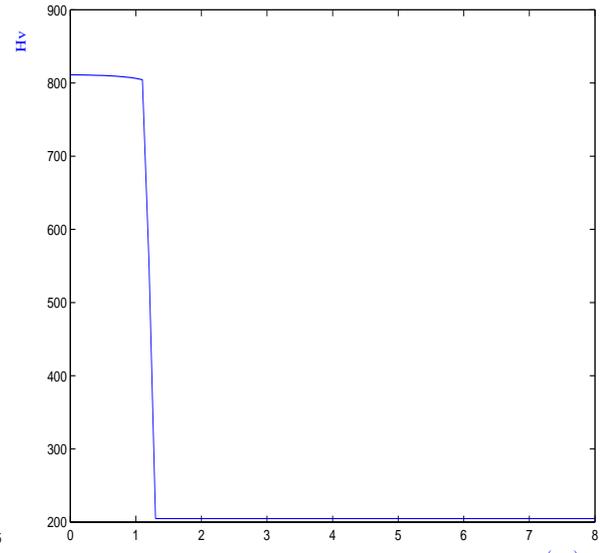


Fig. 5.35 (b) Perfil de la dureza calculada en el centro de la superficie.

Los resultados de las mediciones experimentales se representan en la tabla 5.36.

mm	0.1	0.2	0.3	0.4	0.5	0.6	0.7	0.8	0.9	1.	1.1	1.2	1.3
0	781	744	753	753	709	781	653	646	653	505	378	231	228
0.1	762	772	781	700	772	762	668	717	646	543	381	236	233
0.2	753	744	791	668	762	753	661	638	610	661	372	241	235
0.3	801	781	801	735	709	832	631	548	610	572	375	236	225
0.4	772	781	791	692	726	772	676	684	661	481	375	227	224
0.5	753	726	735	661	753	709	684	624	610	500	336	230	227
0.6	772	744	735	661	717	735	781	604	597	515	336	235	222
0.7	762	762	762	709	735	692	638	490	572	454	296	227	215
0.8	717	822	781	791	854	744	762	638	631	445	278	231	227
0.9	717	762	811	762	752	668	638	597	646	381	261	230	224
1.	735	753	772	676	735	692	653	566	490	429	239	228	231
1.1	726	772	822	726	811	709	709	610	543	368	225	233	228
1.2	744	726	772	700	717	653	646	526	560	388	214	231	225
1.3	709	753	726	653	822	653	646	526	467	333	230	245	239
1.4	735	762	735	692	717	653	566	566	510	248	224	230	224
1.5	726	781	684	692	843	653	624	604	385	238	224	238	228
1.6	709	726	709	744	781	560	684	566	409	239	221	224	233
1.7	684	781	822	717	866	510	753	531	300	236	219	243	250
1.8	735	700	624	668	717	495	560	454	238	231	225	230	228
1.9	753	753	781	726	753	554	624	490	278	236	219	236	238
2.	772	772	617	624	753	515	709	283	221	222	235	231	233
2.1	753	822	692	791	762	495	445	235	222	225	219	231	233
2.2	700	791	624	772	692	476	372	228	225	235	225	224	231
2.3	762	791	684	653	653	445	263	225	224	238	221	227	235

mm	0.1	0.2	0.3	0.4	0.5	0.6	0.7	0.8	0.9	1.	1.1	1.2	1.3
2.4	735	753	554	709	617	330	238	224	227	235	225	227	238
2.5	684	762	684	791	526	255	239	227	227	224	235	243	238
2.6	762	717	700	726	362	224	230	231	224	236	230	231	231
2.7	676	735	458	425	276	221	236	216	224	236	216	231	225
2.8	676	811	495	362	236	218	238	241	231	243	236	236	231
2.9	653	661	449	241	236	214	233	233	214	238	236	235	261
3.	554	433	263	233	221	241	236	214	233	235	225	224	231
3.1	490	353	239	235	222	225	219	231	233	233	263	233	221
3.2	259	245	225	224	238	221	227	214	233	233	214	238	233

Tab. 5.36 Resultados de las medidas experimentales. En horizontal la variación con la profundidad y en vertical con la anchura.

El mapa de durezas en la mitad de la sección presenta unas dimensiones de 6.4 mm de ancho en la superficie y 1.15 mm de profundidad máxima (Fig. 5.37 (a)). El valor máximo alcanzado es de 856.5 Hv. En 5.37 (b) y (c) se aprecian los perfiles horizontal y vertical de la dureza. Se observa que las fluctuaciones de la dureza alrededor de un valor medio oscilan únicamente 50 Hv, lo que contrasta con los 100 Hv de a geometría plana.

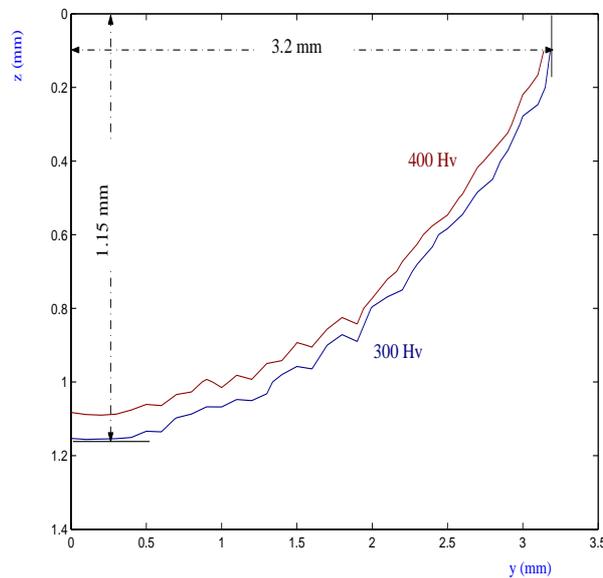


Fig. 5.37 (a) Mapa de dureza y dimensiones de una mitad de la probeta obtenido experimentalmente.

5. Evaluación experimental

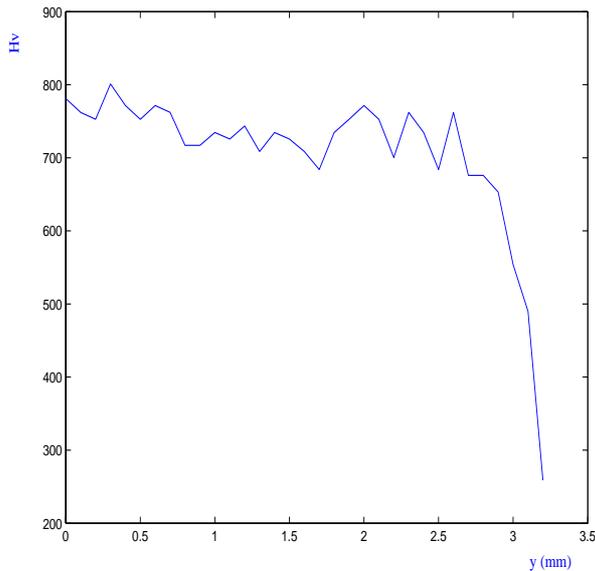


Fig. 5.37 (b) Perfil de la dureza en la superficie de la probeta

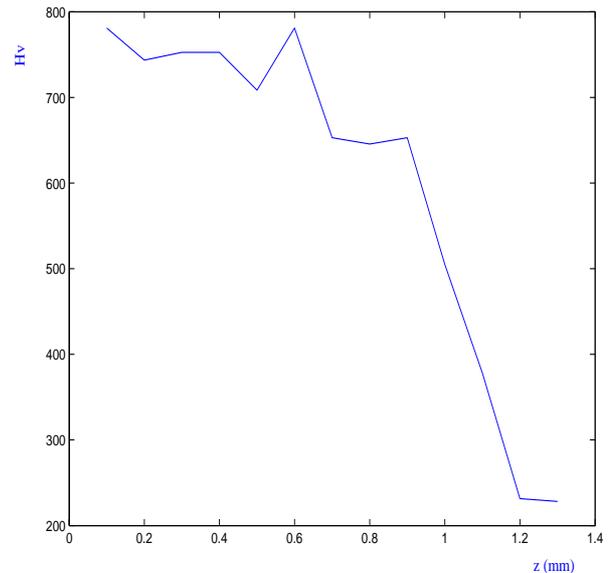


Fig. 5.37 (c) Perfil de la dureza en el centro de la probeta.

Comparación entre los cálculos y las medidas

A continuación se presenta la compilación de los resultados obtenidos, tanto numérica como experimentalmente.

	Calculado	Medido	Diferencia
Ancho máx.	6.8 ± 0.18 mm	6.4 mm	0.4 mm
Profundidad máx.	1.25 ± 0.085 mm	1.15 mm	0.10 mm

[5.12]

A la vista de los resultados, volvemos sacar en conclusión el buen funcionamiento predictivo del modelo de elementos finitos, que en este caso mejora la predicción para la geometría ortoédrica (el error del ancho es de 6% y el de la profundidad de 9%), siendo menores las fluctuaciones en los valores experimentales de la dureza.

Vuelve a aparecer una, en este caso, menor diferencia entre el perfil de dureza medida y la calculada (Fig. 5.37), lo que atribuimos a las irregularidades propias de la composición del material: los cilindros de acero se moldean a partir de una barra sometida a presión por medio de rodillos, mientras que las placas fueron obtenidas a partir de una sección interna de estas barras.

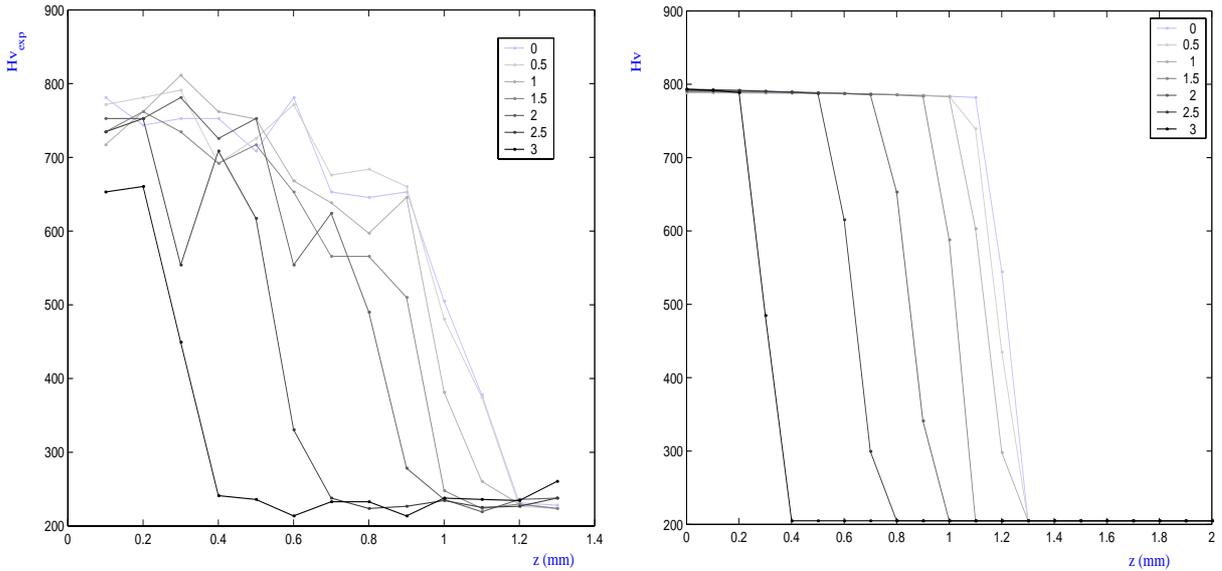


Fig. 5.37 Dureza medida y calculada frente a la profundidad

Una de las razones de esta mayor exactitud está en la curvatura de la geometría que focaliza el calor suavizando las velocidades de enfriamiento (Fig. 5.38) y consecuentemente aumenta la difusión del carbono. Una comparación entre las dimensiones de la región templada calculada y medida permite confirmar esto.

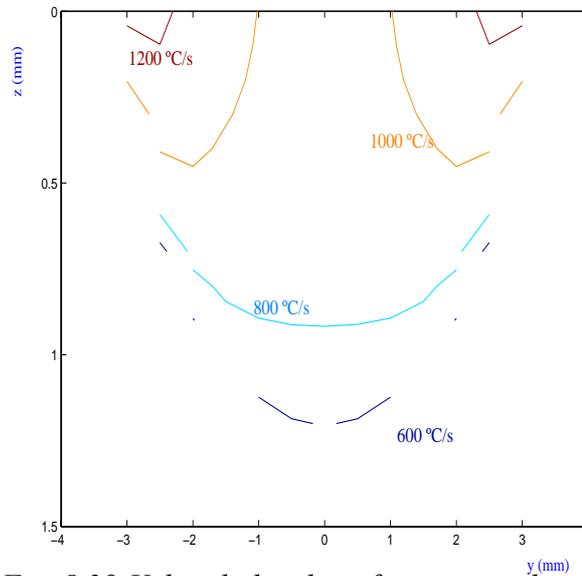


Fig. 5.38 Velocidades de enfriamiento obtenidas con ANSYSTM para la sección estudiada.

	Placa	Cilindro
Ratio ancho máx. calculado/medido	$\frac{6.8}{6} = 1.17$	$\frac{6.8}{6.4} = 1.06$
Ratio profundidad máx. calculado/medido	$\frac{1.06}{0.8} = 1.25$	$\frac{1.25}{1.15} = 1.08$

[5.13]

5. Evaluación experimental

Se observa que mientras que para la geometría cilíndrica se mantiene la relación de proporcionalidad debida a una disminución isotrópica del volumen de la fase martensítica, para la placa la diferencia del comportamiento del material en las dos direcciones es muy diferente.

Bibliografía

- Álvarez¹, J.C., et al (2001); *Real time control and monitoring of laser hardening process application to cylindrical workpieces*; Proceeding of the LANE 2001, Ed. M. Geiger & A. Otto, Meisenbach.
- Álvarez², J.C., et al (2001); *Sistema de puntería para pirómetro*; Patente P200101029, España (23-04-01).
- Atlas Zur Wärmebehandlung der Stähle*, Band 1, Ed. Stahleisen mbH., Düsseldorf, 1954/58.
- Braz, F.M. et al. (1985); *Mathematical model coupled phase transformation and temperature evolution during quenching of steels*; Materials Science and Technology, Vol. 1, pp. 838-844.
- Doane, D.V., J.S. Kirkaldy (1977); *Hardenability with applications to steel*; Proceedings of a Symposium held at the Sheraton-Chicago Hotel. October 1977, pp. 518-545.
- Farias, D. (1991); *Traitement thermique laser de l'acier XC42 et modélisation des transformations de phases en cycles thermiques rapides au chauffage et au refroidissement*; Thèse de doctorat, I.N.P.L., Nancy.
- Melander, M., J. Nicolov (1985); *Heating and cooling transformation diagrams for the rapid heat treatment of two alloy steels*; American Society for Metals, Vol. 4, No. 1, June 1985.
- Sanesteban, J. (2002); *Desarrollo de un modelo numérico para la predicción del endurecimiento superficial de aceros procesados con láser*; Trabajo presentado a la comisión de doctorado del Departamento de Ingeniería Industrial II.
- Smithells, C.J. (1992); *Smithells metals reference book (7th ed)*; Ed. E.A. Brandes & G.B. Brooks, Oxford: Butterworth-Heinemann.
- Victor, M. et al. (1998); *A computational model for the prediction of steel hardenability*; Metallurgical and Materials Transactions B. Vol. 29B, June 1998, pp. 661-672.
- Wang, K.F., S. Chandrasekar, H.T.Y. Yang (1997); *Experimental and computational study of the quenching of carbon steel*; JMSE, Vol. 119, pp257-265

Capítulo 6

Conclusiones

6. Conclusiones

- La focalización de la energía de un láser en un área pequeña de un material permite restringir las transformaciones metalúrgicas a las zonas deseadas, sin alterar otras propiedades. Esto da muestras de la extraordinaria idoneidad del láser para realizar tratamientos térmicos superficiales localizados. Ahora bien, esta alta concentración energética hace que la elección de los parámetros del proceso sea crítica para llegar a un buen resultado en el temple de los aceros.

- Los métodos analíticos aportan rapidez en la estimación de los parámetros del procesado con láser. Más concretamente:
 - La caracterización y aplicación del método de las imágenes a la ecuación del calor en las geometrías planas y cilíndricas nos suministró una herramienta potente para simular situaciones donde las propiedades térmicas del material no tengan dependencia con la temperatura. Los resultados aportados fueron empleados como patrón de calibración del modelo de elementos finitos.

 - La adimensionalización de la ecuación del calor nos permitió obtener unas relaciones muy simples entre la temperatura máxima alcanzada en una muestra, la posición de este máximo y los parámetros del proceso. El estudio de estos datos proporcionó el establecimiento de un criterio de selección de los parámetros más apropiados para cada proceso. Así mismo, este análisis dimensional constituye un excelente instrumento para determinar el error debido a las incertidumbres experimentales.

- Para facilitar la aplicación del método de los elementos finitos con ANSYSTM en la simulación de tratamientos térmicos superficiales con láser se desarrolló un programa escrito en Fortran 77 (*laser*). Las grandes ventajas de este programa están por un lado en la celeridad en su aplicación, y por otro en que permite, muy fácilmente, introducir modificaciones en el modelo. Este código posibilita elegir entre tres geometrías reticuladas con una malla uniforme (lo que propicia

el control de los errores debidos a la discretización) y trabajar con varios tipos de haz (TEM00, TEM01* y rectangular).

- El estudio de los errores que introducen las distintas configuraciones de la malla, así como la discretización del haz y su movimiento favoreció la consecución de un criterio de elección del mejor tipo de reticulación según nuestras necesidades y así optimizar el consumo tanto de memoria como de tiempo de CPU.
- La discretización de los diagramas ITH y TTT en pasos isotérmicos y a transformación constante y el empleo de un código numérico nos permitió describir las transformaciones de fase presentes durante el tratamiento así como la dureza resultante.
- Los resultados obtenidos en el tratamiento de dos geometrías indican el buen funcionamiento del modelo en la determinación de la anchura y la profundidad de la región templada. Hay que señalar que la mejor estimación se obtiene en el caso del endurecimiento de una probeta cilíndrica.

Epílogo

Epílogo

Autores como Bathe (páginas 3 e 226), Bokota (p. 1384), Buchmayr (p. 129), Denis (p. 317) y Fernandes (p. 839) estructuran las simulaciones numéricas como una jerarquía donde la relación existente entre los distintos estadios es la de vecindad (Bathe, 1996) (Bokota, 1996) (Buchmayr, 1990) (Denis, 1992) (Fernandes, 1985). Comienzan con la formulación de un problema físico y su expresión matemática, siguiendo con la simulación numérica y finalizan con la interpretación de los resultados generados por la aplicación de los elementos finitos. En la Fig e.1 se puede ver el esquema empleado por Bathe.

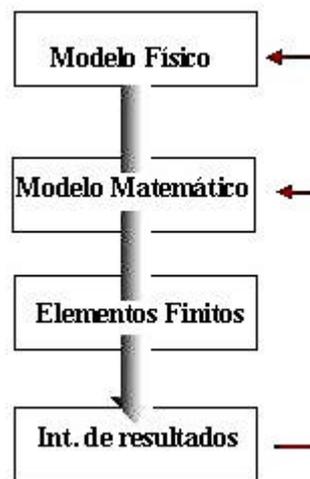


Fig. e.1 Esquema vertical propuesto por Bathe. El ciclo se cierra al interpretar los resultados.

La experiencia acumulada en este trabajo nos lleva a considerar más oportuno otro tipo de guión más complejo definido por los siguientes elementos:

- i. En una simulación numérica diferenciamos entre resultado y solución¹. El primero es fruto de realizar una operación matemática, mientras que el segundo será la interpretación del resultado tomando como referencia el

¹ El Diccionario de la Real Academia de la Lengua define estos términos del siguiente modo:

Resultado Efecto y consecuencia de un hecho, operación o deliberación.

Solución² 6. Desenlace o término de un proceso.

7. Cada una de las cantidades que satisfacen las condiciones de un problema o de una ecuación.

valor de su error. En otras palabras, entre las atribuciones del investigador está la de fijar el error admisible de un resultado.

- ii. Proponemos un contraste continuo entre resultados según se van produciendo hasta alcanzar, con la precisión deseada, una solución. Entonces, sustituiremos la estructura vertical descendente por otra que permita la interacción entre todos los niveles de la investigación. El nexo de unión intersticial será la evaluación de resultados (*Fig. e.2*). Es evidente que dentro de esta distribución pueden aparecer relaciones jerárquicas, como la establecida entre la formulación matemática y el modelo numérico.

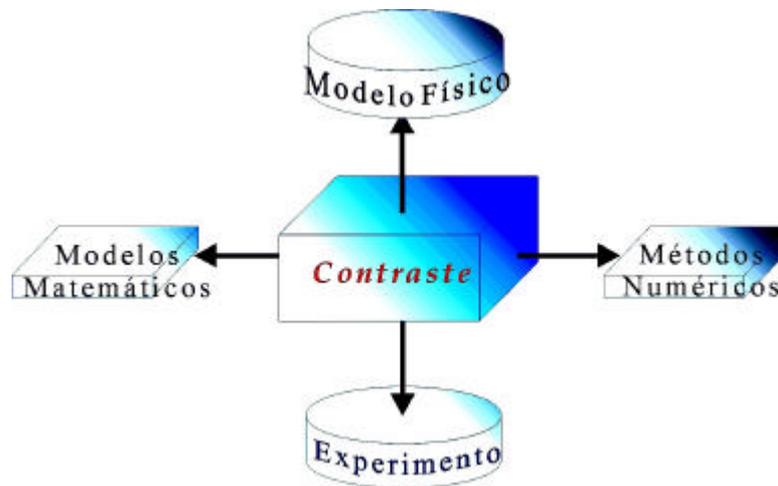


Fig. e.2 En nuestra opinión es más apropiado tener un método de evaluación de resultados que actúe en todos los niveles.

- iii. En una simulación cabe la posibilidad de emplear varios métodos numéricos. Su función sería multipolar: aisladamente se usarían para predecir el valor de algunas magnitudes, mientras que, conjugados, podrían contribuir a contrastar los errores producidos.
- iv. La *Fig. e.1* parece indicar que, para J-K. Bathe, la finalidad de las simulaciones numéricas es la sustitución de la experimentación en el laboratorio. Nosotros, por el contrario, consideramos que las distintas tareas de investigación se complementan y, sólo en algunas situaciones, pueden llegar a sustituirse.

Bibliografía

Bathe, J-K. (1996); *Finite element procedures*; Prentice Hall.

Bokota, A., S. Iskierka (1996); *Effect of phase transformation on stress states in surface layer of laser hardened steel*; ISIJ International, Vol. 36, No. 11, pp 1383-1391.

Buchmayr B. & J.S. Kirkaldy (1990); *Modelling of the temperature field, transformation behaviour, hardness and mechanical response of low alloy steels during cooling from the austenite region*; J. Heat Treat 8:127-136.

Denis, S. et al. (1992); *Mathematical model coupling phase transformations and temperature evolutions in steels*; ISIJ International, Vol. 32, No. 3, p. 316-325.

Fernandes, F.M.B. et al. (1985); *Mathematical model coupling phase transformations and temperature evolution during quenching of steels*; Materials Science and Technology. October 1985 Vol. 1, pp. 838-844.

Anexo I

Archivo de entrada *laser.in*

```
C_>Formatos:a10,e10.4,i10
*-> itrans = 1, simula un transitorio,
*-> itrans = 0, simula un estacionario.
*-> irad = 1, simula as perdidas por radiacion.
itrans =      1
irad =      0

c
C_> Dimensiones e características da malla
c
*-> Dimension das malla, en metros:
deltax = 0.1000E-02  5.0E-04
deltay = 0.1000E-02  5.0E-04
deltaz = 0.1000E-02  1.0E-04

*-> Numero de incrementos: OX, OY, OZ
* A modificación destes parámetros implica alteracions
* graves dentro da dimensión de determinadas variables.
iend(x) =      23      28      23
jend(y) =      8      28      8
kend(z) =      6      20

c
C_> Cilindro
c
*-> Variable lóxica: se esta a 1
* activa o desenho do cilindro.
Completo =      0
Arco =      1
*-> Radios interior e exterior do cilindro.
*-> O radio interior e' igual o' radio
* exterior menos a parte máisada (kend*delta).
rad int. = 12.5e-3

c
C_> Características do Laser
c
*-> Posición inicial do feixe
* paralelepípedo: xc0, yc0 (m)
* cilindro ou arco: phi0 (rad)
xc0, yc0 = 0.e-3 15.e-3
phi0 = 0.0e+0

*-> Tamaño da gaussiana, en metros:
sigma = 1.50e-3
```

laser.in (continuación)

*-> Velocidade do laser, OX+, OY+ en metros/s:

vbm = 10.00e-3 0.000e-0

*-> Potencia do laser, en Watts:

potencia = 0.969e+3

*-> Absortividade

abs = 1.00e+0

c_____

C_> Temperatura inicial en Kelvin.

c_____

temp.ini = 3.00e+2

c_____

C_> Radiacion o' contorno.

c_____

*-> emisividade a 212 K (??)

emis = 0.066

*-> Cte. de Stefan Boltzman ($Wm^{-2}K^{-4}$)

cte. S-B = 5.6697e-8

c_____

C_> Bucle temporal

c_____

*-> N. de veces que pasa o laser, e que enfria

*-> Incremento temporal (s), e pasos de quencemento

*_> e enfriamento:

n pasada 1 0

helice (m) 0.

inc. tempo 9.8e-3

nlaser 612

inc. tempo 8.8e-3

nenfriam. 0

C_> O Numero de Fourier e' 10.

C_> Simulacions feitas con ANSYS

Archivo de entrada *mat.in*

01 _____Aceiro Inoxidable Forxado Martensitico_____

02 CONDUCTIVIDADE

03

04 Deno: Aceiro Inox 84200; F114 060A42 EN 8 (*)

05 Comp: 0.42 %C; 0.64 %Mn

06

07 Ref: Smithells Metals Reference Book

08 E.A. Brandes & G.B. Brook (BH)

09 Signatura: CM.M 37

10

11 _____

12 CALOR ESPECIFICO A PRESION CONSTANTE

13

14 Deno: Aceiro Inox 84200; F114 060A42 EN 8 (**)

15 Comp: 0.42 %C; 0.64 %Mn

16

17 Ref: Smithells Metals Reference Book

18 E.A. Brandes & G.B. Brook (BH)

19 Signatura: CM.M 37

20

21 _____

22 DENSIDADE

23

24 Deno: Aceiro Inox 84200; F114 060A42 EN 8 (***)

25 Comp: 0.42 %C; 0.64 %Mn

26

27 Ref: Smithells Metals Reference Book

28 E.A. Brandes & G.B. Brook (BH)

29 Signatura: CM.M 379

30

31 _____

32

33 Temperatura de Austenizacion: 1253. - 1338. K

34 Temperatura de Fusion: 1723. - 1783. K

35 Temperatura de recocido: 923. 1033. K

36 Temperatura de temple: Tac1 1253. K

37 Tac3 1338. K

38

39 NOTA: Os valores das propiedades para as temperaturas

40 de 1500 e 2000 K son FICTICIOS. Acabado Tanxencial.

41 _____

mat.in (continuación)

i3 i3 i3					
9 8 9<- numero de pares (T,K)*, (T,Cp)**, (T,d)***					
Temp.(K)	K(W/mK)	Temp.(K)	Cp(J/kgK)	Temp.(K)	d(kg/m^3)
e12.4	e12.4	e12.4	e12.4	e12.4	e12.4
298.0e+0	51.9e+0	298.0e+0	4.860e+2	298.0e+0	7.8500e+3
373.0e+0	50.7e+0	373.0e+0	4.860e+2	373.0e+0	7.7527e+3
473.0e+0	48.2e+0	473.0e+0	5.150e+2	473.0e+0	7.7171e+3
673.0e+0	41.9e+0	673.0e+0	5.860e+2	673.0e+0	7.6405e+3
873.0e+0	33.9e+0	873.0e+0	7.080e+2	873.0e+0	7.5613e+3
1073.0e+0	24.7e+0	1073.0e+0	6.240e+2	1073.0e+0	7.5618e+3
1273.0e+0	26.8e+0	1500.0e+0	6.150e+2	1273.0e+0	7.4627e+3
1500.0e+0	34.4e+0	2000.0e+0	6.150e+2	1500.0e+0	7.5641e+3
2000.0e+0	34.4e+0			2000.0e+0	7.5641e+3

A

absorción 1335
 absortividad 59,168
 adimensionales, método 118
 adimensionales, variables 119
 apuntador, sistema 168
 arco de cilindro, aproximación 189
 Avrami, ecuación de 153

B

Beer-Lamber, ecuación 35
 bombeo 18
 brillo 23

C

calidad de discretización 142
 capa límite 60
 ciclos térmicos 156,180,192
 coeficiente de absorción, determinación 168
 coeficientes de Einstein 14,16
 coherencia 23
 coherencia espacial 24
 coherencia longitudinal 24
 coherencia temporal 24
 colimación (ver direccionalidad)
 comparación entre cálculos y medidas 187,198
 conducción, ecuación de 57
 cuerpo negro, ley de radiación 15,58
 CPU 148
 criterio de contraste 147

D

diagramas IT 91
 diagramas TTT 91
 difusividad térmica 67
 direccionalidad 22
 Doppler, efecto 21

E

emisión estimulada 13
 emisividad 59
 emisividad, corrección 168
 error de aproximación 108
 error debido a la discretización del haz 142
 error debido a la discretización del haz en movimiento 143
 error debido a la discretización espacial 131
 error debido a la discretización temporal 132
 error debido a mallas mixtas 135
 error debido a mallas mixtas de cubos y trapecios 138
 error debido a pequeñas variaciones en los parámetros 118
 error debido a una malla adaptativa 137
 error debido a una malla anisótropa 132
 error debido al ángulo de deformación 140

experimentación en el laboratorio 167

F

haz rectangular estacionario 114
 fluorescencia 13
 flujo estacionario 64
 flujo estacionario con movimiento de material 66
 flujo estacionario sin movimiento de material 65
 flujo transitorio con movimiento de material 69
 flujo transitorio sin movimiento de material 67
 Fourier, ley de 57
 Fourier, número de 84
 función dieléctrica 35

G

Garlekin, método 75,81
 Green, función 65-70
 Green, identidad 81

H

Hildenwall y Ericson, modificaciones de 155

I

inversión de población 17

J

Johnson-Mehl, ecuación 153

K

keyhole 51
 Kirchhoff, ley de 60
 Kirkaldy, ecuaciones 159

L

Laplace, ecuación de 65
 láser de cuatro niveles 17
 láser de dos niveles 13-15
 láser de tres niveles 16
 laser, programa 125-130
 láseres de coloides 32
 láseres de electrones libres 33
 láseres de estado sólido 28
 láseres de excímeros 27
 láseres de gas 25
 láseres de gases ionizados 26
 láseres de gases neutros 25
 láseres de Nd:YAG 29
 láseres de rubí 28
 láseres de semiconductores 30
 láseres de vapor metálico 28
 láseres moleculares 26
 limpieza 45
 líneas espectrales (ver Doppler)

M

mallado adaptativo 77,137
 mallado homogéneo anisótropo 132

- mallado homogéneo e isótropo* 131
Mapa de austenita 181,193
mapa de durezas 183,186,197
mapa de martensita 182,194
material, propiedades 176,177
matriz de estructura 76
Maxwell-Boltzman, estadística 14
medio activo 15
método de las imágenes sobre geometrías cilíndricas 100
método de las imágenes sobre geometrías planas 97
método de las imágenes: anchura 102
método de las imágenes: área 102
método de las imágenes: contribución de los términos 104
método de las imágenes: convergencia 100
método de las imágenes: error 108
método de las imágenes: fuentes con movimiento paralelo 111
método de las imágenes: fuentes con movimiento perpendicular 109
método de las imágenes: número de términos 105
método de los elementos finitos 75
*modo TEM01** 116,127
modo TEM01, discretización* 127
modo TEM01, giro* 129
monocromaticidad 20
- N**
Newman, condiciones de contorno tipo 80
Newmark, método de 82
Newton, ley de enfriamiento de 61
- P**
parámetros, búsqueda 172,188
Peclet, número de 110,113,120
Planck, ley de 15,58
plasma 39
Poisson, ecuación de 65
polarización 24
Primer Principio 63
propagador (ver Green, función)
- R**
Rayleigh-Ritz, algoritmo de 75
recargamiento 44
reflectividad 59
refusión 45
regla del trapecio (ver Newmark, método de)
relación de aspecto 77
residuos, métodos de 81
resonador óptico 19
resonador óptico, modos propios 20
- resultados de los cálculos y de las medidas* 187,198
régimen estacionario 64
- S**
Stefan-Boltzmann, ley de 58
- T**
temperatura máxima, cálculo 120
temple 43
transmisividad 59
- V**
variacionales, métodos 74
velocidad de la colada 38
Vien, desplazamiento de 58
- X**
geometría cilíndrica 188
geometría plana 172