

ANÁLISIS DEL FLUJO DE CALOR EN MATERIALES GRADUADOS FUNCIONALMENTE EN CONTACTO MEDIANTE EL MÉTODO DE LOS ELEMENTOS DE CONTORNO

J. P. Núñez*[#], V. Mantic*, F. Paris*, J. Berger**

*Escuela Superior de Ingenieros. Univ. de Sevilla. Camino de los Descubrimientos s/n, 41092 Sevilla

**Colorado School of Mines. Golden, 1500 Illinois Street, CO 80401, USA

e-mail: mantic@esi.us.es, paris@esi.us.es, jberger@mines.edu

Palabras Clave: *Materiales Graduados Funcionalmente (FGMs), Materiales Anisótropos, Conducción de calor, Revestimientos térmicos, Método de los Elementos de Contorno.*

Resumen: *Se desarrolla una aplicación del Método de los Elementos de Contorno para los problemas del flujo de calor estacionario en los sólidos anisótropos en contacto. Las conductividades térmicas en cada sólido se consideran constantes o con una variación exponencial en una dirección arbitraria pero fija. Los resultados numéricos presentados demuestran la utilidad del código computacional desarrollado para el estudio de las aplicaciones de los materiales graduados funcionalmente (FGMs) como las barreras térmicas de los álabes en los motores térmicos sometidos a altas temperaturas.*

Abstract: *A Boundary Element analysis of steady-state heat transfer problems in anisotropic solids in contact is developed. Thermal conductivities in each solid are considered to be constant or with an exponential variation in a fixed but arbitrary direction. Numerical results presented demonstrate usefulness of the computational code developed for an analysis of applications of Functionally Graded Materials (FGMs) as thermal barrier coatings in high-temperature turbine engine applications.*

1.- INTRODUCCIÓN

La potencia que generan los motores térmicos (por ejemplo las turbinas de gas o motores de aviones) depende fundamentalmente de la temperatura máxima del ciclo que describe el fluido que circula por el motor. Sin embargo, esta temperatura máxima está limitada por el material que conforma los álabes de la turbina de tal forma que cualquier descubrimiento o avance en la mejora de las propiedades de los materiales y su resistencia a altas temperaturas influye de manera importante en el rendimiento de los motores térmicos.

[#]Ahora en GECL, 5-7 rue François Truffaut, 91000 Evry, France

Para proteger las partes metálicas de un calor excesivo en las aplicaciones de alta temperatura se han utilizado los revestimientos convencionales homogéneos de materiales cerámicos. La dificultad en su utilización consiste en que, debido a las altas tensiones residuales y térmicas que aparecen en la interfase unidas a la baja resistencia al despegue de la misma así como a la baja tenacidad del revestimiento, estos materiales son propicios al agrietamiento y desconchado, lo que conduce a una pérdida de la protección térmica y finalmente al fallo del componente estructural¹.

En los nuevos diseños de los revestimientos térmicos se aplican las capas o las entre-capas con una composición graduada del metal y de la cerámica de tal forma que las propiedades termomecánicas del revestimiento cerca del sustrato metálico y las del propio sustrato metálico fueran similares. Estos nuevos materiales se pueden considerar como materiales compuestos no homogéneos de partículas en los cuales la fracción volumétrica de los constituyentes y posiblemente la micro-estructura del material varía a través del espesor. La aplicación de estos materiales, llamados materiales graduados funcionalmente (Functionally Graded Materials - FGMs)², permite reducir las tensiones residuales e incrementar la resistencia al despegue y además, debido al aumento del contenido del metal en el revestimiento, se aumenta su tenacidad³. Su proceso de fabricación se basa en un control exhaustivo de la porosidad, que se hará mayor cerca del sustrato y menor en la superficie de tal forma que al difundir una aleación metálica por el material se obtenga el efecto deseado.

El presente trabajo está enmarcado dentro de un trabajo más amplio que es el desarrollo de una herramienta de cálculo para analizar problemas térmicos y termoelásticos planos que incluyen los FGMs anisótropos, y en particular estudiar el efecto de la presencia de grietas y contacto en los especímenes sometidos a un flujo de calor. Debido a las bien conocidas ventajas del Método de los Elementos de Contorno (MEC) para el análisis de las grietas y el contacto⁴, sobre todo a su inherente precisión en la evaluación de los parámetros de los estados tensionales singulares, se ha optado por este método en el desarrollo de dicho código. En este artículo se presenta la primera parte del trabajo descrito, que es el desarrollo de un código para el análisis del flujo de calor estacionario en problemas con FGMs.

El MEC es un método numérico aplicado a la solución de las Ecuaciones Integrales de Contorno (EIC) correspondientes a un problema determinado. La formulación general de las EIC para el problema del flujo de calor estacionario en medios anisótropos homogéneos a trozos desarrollada previamente⁵ se ha implementado⁶ en un código del MEC más general ya existente en el Grupo de Elasticidad y Resistencia de Materiales de la ESI de Sevilla. El énfasis de este artículo está en la formulación de la EIC, y su implementación en dicho código, para los FGM anisótropos con una variación exponencial de las conductividades térmicas. El enfoque aquí presentado se podría fácilmente extender a otros tipos de variación de las conductividades⁷, como por ejemplo la cuadrática. Finalmente se presentan soluciones numéricas de dos problemas. El primero con una solución analítica conocida, para demostrar un correcto funcionamiento del código desarrollado. El segundo representa una simulación sencilla del problema de un sustrato homogéneo y un revestimiento de tipo FGM con un despegue asimilable a grieta situada en la interfase.

2.- EL PROBLEMA DEL FLUJO DE CALOR EN FGM EXPONENCIALES

Se considera el flujo de calor estacionario en un sólido bidimensional $D \subset \mathbb{R}^2$ en el plano (x_1, x_2) y con un contorno ∂D suave a trozos. El material del sólido se supone en general anisótropo con una variación de las conductividades de forma:

$$k_{ij}(\mathbf{x}) = K_{ij} \exp\{2\boldsymbol{\beta} \cdot \mathbf{x}\} \quad \mathbf{x} \in D, \quad i, j = 1, 2,$$

donde el vector constante $\boldsymbol{\beta} = (\beta_1, \beta_2)$ representa la dirección y magnitud de la variación. $\boldsymbol{\beta}$ se considera real o complejo imaginario. La matriz \mathbf{K} es simétrica y positiva definida. Para materiales isotrópicos $K_{ij} = K\delta_{ij}$. El flujo de calor se calcula como $h_i(\mathbf{x}) = -k_{ij}(\mathbf{x})T_{,j}(\mathbf{x})$ donde $T(\mathbf{x})$ es la temperatura del sólido. El flujo normal asociado a un vector normal unitario $\mathbf{n}(\mathbf{x})$ se evalúa como $q(\mathbf{x}) = n_i(\mathbf{x})h_i(\mathbf{x})$. La Ley de Fourier $h_{i,j}(\mathbf{x}) = Q(\mathbf{x})$, donde $Q(\mathbf{x})$ es la intensidad del flujo de calor, se puede escribir en términos de temperatura como:

$$-(K_{ij}T_{,ij}(\mathbf{x}) + 2\beta_i K_{ij}T_{,j}(\mathbf{x})) \exp\{2\boldsymbol{\beta} \cdot \mathbf{x}\} = Q(\mathbf{x}). \quad (1)$$

En cada parte del contorno $\partial D = \partial D_T \cup \partial D_q \cup \partial D_R \cup \partial D_{cp} \cup \partial D_{ci}$ definimos un tipo de condiciones de contorno o de contacto térmico con otros sólidos. Así, tenemos:

$$T = T_0 \text{ en } \partial D_T, \quad q = q_0 \text{ en } \partial D_q, \quad T - T_0 = R_T q \text{ en } \partial D_R,$$

donde T y q son la temperatura y el flujo normal prescritos, T_0 es la temperatura ambiental y R_T es el coeficiente de resistencia térmica (puede ser una variable de punto). Adicionalmente:

$$q^A + q^B = 0, T^A - T^B = 0 \quad \text{en } \partial D_{cp}, \quad q^A + q^B = 0, T^A - T^B = R_T q^A \quad \text{en } \partial D_{ci}$$

donde ∂D_{cp} y ∂D_{ci} representan respectivamente las zonas de contacto perfecto e imperfecto entre el sólido aquí analizado, señalado como A , y el otro señalado como B .

3.- DESARROLLO DEL MEC PARA LOS FGM EXPONENCIALES

3.1.- Solución fundamental para los FGM exponenciales

La solución fundamental es la solución en temperatura en todo el plano originada por una fuente de calor puntual⁴, $Q(\mathbf{x}) = \delta(\mathbf{x} - \mathbf{y})$, $\mathbf{y} \in \mathbb{R}^2$, donde $\delta(\mathbf{x} - \mathbf{y})$ es la función delta. La solución fundamental de la ecuación (1) tiene la expresión⁸:

$$G(\mathbf{x}, \mathbf{y}) = -\frac{K_0(\kappa R)e^{-\beta \cdot (\mathbf{x} + \mathbf{y})}}{2\pi \det \mathbf{K}}$$

donde \mathbf{y} es el punto de la fuente de calor, \mathbf{x} es el punto donde se evalúa la temperatura, $\kappa = \boldsymbol{\beta}^T \mathbf{K} \boldsymbol{\beta}$, $R = \mathbf{r}^T \mathbf{K}^{-1} \mathbf{r}$ siendo $\mathbf{r} = \mathbf{x} - \mathbf{y}$, K_0 es la función de Bessel modificada de orden cero. Para los materiales isotrópicos esta expresión coincide con la obtenida previamente⁹. Se puede observar que $G(\mathbf{x}, \mathbf{y}) = G(\mathbf{y}, \mathbf{x})$. El flujo normal correspondiente a $G(\mathbf{x}, \mathbf{y})$ se calcula como su derivada conormal⁸:

$$\frac{\partial G(\mathbf{x}, \mathbf{y})}{\partial v_x} = -n_i(\mathbf{x}) K_{im} e^{2\boldsymbol{\beta} \cdot \mathbf{x}} \frac{\partial G(\mathbf{x}, \mathbf{y})}{\partial x_m} = -\frac{e^{\boldsymbol{\beta} \cdot \mathbf{r}}}{2\pi \det \mathbf{K}} \left(\frac{\kappa}{R} (\mathbf{n} \cdot \mathbf{r}) K_1(\kappa R) + (\mathbf{n}^T \mathbf{K} \boldsymbol{\beta}) K_0(\kappa R) \right),$$

donde $\mathbf{n} = \mathbf{n}(\mathbf{x})$ y K_1 es la función de Bessel modificada de primer orden.

3.2.- Ecuación Integral de Contorno para los FGM exponenciales

Consideremos el estado real en el teorema de Green de reciprocidad para el sólido D como aquél definido en el contorno ∂D por la temperatura $T(\mathbf{x})$ y el flujo normal $q(\mathbf{x})$ asociado a la normal exterior a ∂D , y con $Q(\mathbf{x}) \equiv 0$. Entonces si el estado auxiliar es el definido por $G(\mathbf{x}, \mathbf{y})$ y $\frac{\partial G(\mathbf{x}, \mathbf{y})}{\partial v_x}$ para $\mathbf{y} \in D \cup \partial D$, se puede obtener con un procedimiento estándar^{4,5,6} la EIC de temperatura para los FGM exponenciales:

$$c_K(\mathbf{y})T(\mathbf{y}) + \int_{\partial D} \left(\frac{\partial G}{\partial v_x}(\mathbf{x}, \mathbf{y})T(\mathbf{x}) - G(\mathbf{x}, \mathbf{y})q(\mathbf{x}) \right) dS_x = 0, \tag{2}$$

donde $c_K(\mathbf{y}) = 1$ si $\mathbf{y} \in D$, $c_K(\mathbf{y}) = 0.5$ si \mathbf{y} es un punto en una parte suave de ∂D y

$$c_K(\mathbf{y}) = \frac{1}{2} - \frac{1}{2\pi} \text{sgn}(\mathbf{n}^{(1)} \wedge \mathbf{n}^{(2)}) \arccos(\mathbf{n}_{,K}^{(1)} \cdot \mathbf{K} \mathbf{n}_{,K}^{(2)}), \quad \mathbf{n}_{,K}^{(e)} = \frac{\mathbf{n}^{(e)}}{\mathbf{n}^{(e)} \cdot \mathbf{K} \mathbf{n}^{(e)}}$$

si \mathbf{y} es el vértice de una esquina de ∂D con los vectores normales exteriores $\mathbf{n}^{(1)}$ y $\mathbf{n}^{(2)}$. Resolviendo EIC (2) para $\mathbf{y} \in \partial D$ después de aplicar las condiciones de contorno (y en su caso las de contacto) se obtienen los valores de T y q en ∂D desconocidos. Una vez conocidos T y q en todo ∂D , se evalúa T en D utilizando (2) para $\mathbf{y} \in D$.

3.3.- Implementación del código del MEC

El algoritmo de resolución numérica de la EIC (2) se ha implementado⁶ de acuerdo al procedimiento general del MEC de colocaciones descrito en París y Cañas⁴. El contorno del sólido y las variables se han discretizado mediante elementos lineales continuos. Las integrales se evalúan numéricamente sobre los elementos que no incluyen el punto de

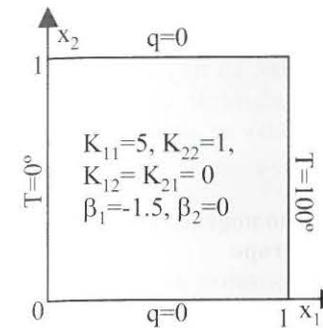


Fig. 1. Configuración de placa cuadrada de FGM.

colocación. Se ha utilizado un enfoque semianalítico para el cálculo de las integrales sobre los elementos que incluyen el punto de colocación. Los términos singulares obtenidos de los desarrollos asintóticos de las funciones de Bessel se han integrado analíticamente y los términos regulares restantes se han integrado numéricamente.

4.- EJEMPLOS

4.1.- Placa cuadrada de FGM anisótropo

Se considera un problema para una placa según la figura 1 en el cual se conoce la solución analítica⁹:

$$T(x_1, x_2) = 100 \left(1 - e^{-2\beta_1 x_1} \right) \left(1 - e^{-2\beta_1} \right)^{-1}$$

La solución en q es constante en toda la placa. El exponente $\beta_1 = -1.5$ corresponde a una reducción de las conductividades térmicas entre las caras $x_1 = 0$ y $x_1 = 1$ de valor 0.0498. El contorno se ha discretizado con 120 elementos uniformemente distribuidos.

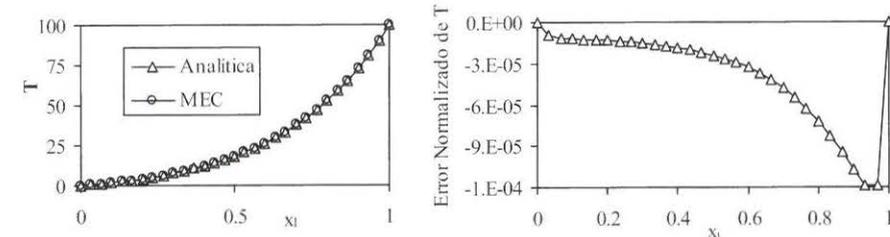


Fig. 2. a) Evolución de T . b) Error normalizado de T .

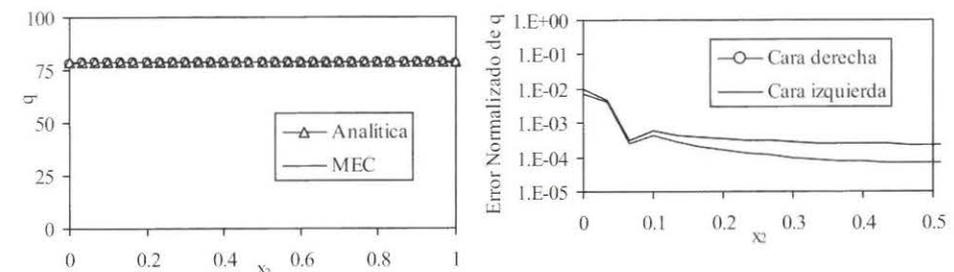


Fig. 3. a) Evolución de q en la cara derecha. b) Valor absoluto del error normalizado de q .

Se presenta una comparación de la solución analítica en T y en q con la obtenida por el MEC. En la figura 2a se observa una excelente coincidencia entre la solución numérica y la analítica en T . Para conocer la precisión de la solución obtenida se presentan en la figura 2b los errores de T normalizados al valor máximo de T en la placa. Aunque en la figura 3a tampoco es apreciable la diferencia entre la solución analítica y numérica en q , los errores

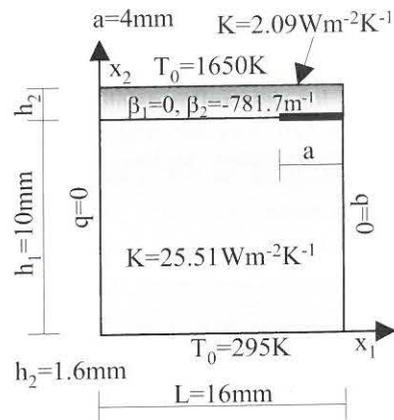


Fig. 4. Configuración de sustrato con revestimiento.

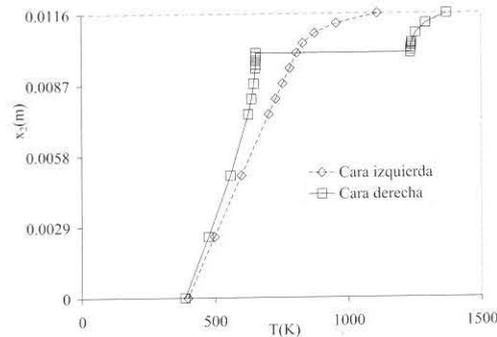


Fig. 5. Evolución de T en las caras laterales.

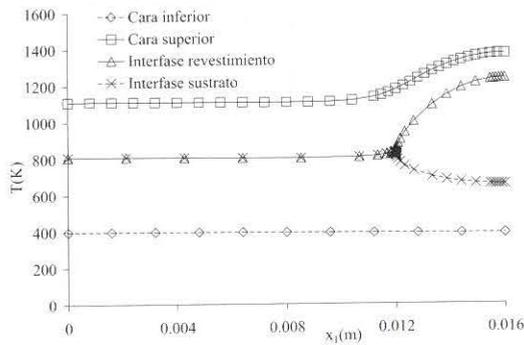


Fig. 6. Evolución de T en las caras horizontales y en la interfase.

en q son mayores que los de T . Se pueden observar pequeñas oscilaciones debido a la proximidad de las esquinas. La magnitud de estas oscilaciones es aproximadamente de un 1% del valor de q analítico, como se puede ver en la figura 3b.

4.2.- Sustrato isótropo homogéneo con revestimiento FGM isótropo

Se considera una configuración de sustrato con revestimiento sometida a una elevada T en la cara superior del revestimiento y con un despegue en la interfase modelado como una grieta, figura 4. La conductividad térmica del revestimiento coincide con la del sustrato en la interfase. Las resistencias térmicas en las caras exteriores superior e inferior son $R_T=5 \times 10^{-4} \text{W}^{-1} \text{m}^2 \text{K}$ y $R_T=10^{-4} \text{W}^{-1} \text{m}^2 \text{K}$ respectivamente. Aunque el código aplicado permita considerar una resistencia térmica finita y variable a lo largo de la grieta (que en un modelo más realista podría ser función de la presión de contacto en los labios de la grieta o de la separación de los mismos), los resultados aquí presentados corresponden a una resistencia infinita, es decir la grieta actúa como un aislante perfecto. Para discretizar el sustrato y revestimiento se han utilizado 77 y 93 elementos de contorno respectivamente, discretizando la interfase con una malla conforme.

Los resultados de T obtenidos en las caras laterales se presentan en la figura 5. En la cara derecha la grieta provoca un salto en T con pendientes nulas en los labios de la grieta de acuerdo con la condición de contorno, un aislamiento perfecto. La evolución encontrada de T aproximadamente lineal en el sustrato y exponencial en el revestimiento en la cara izquierda está de acuerdo con las soluciones mono-dimensionales en cada tipo de material y se corresponde con el hecho de que la perturbación del flujo de calor debido a la grieta se haya amortiguado a esta distancia.

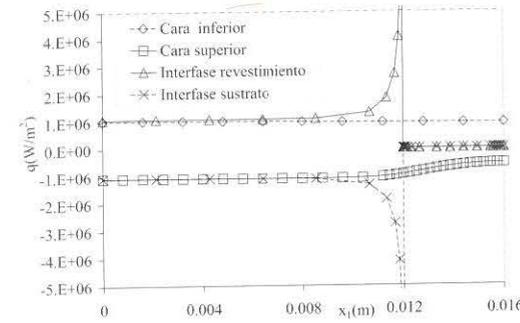


Fig. 7. Evolución de q en las caras horizontales y en la interfase.

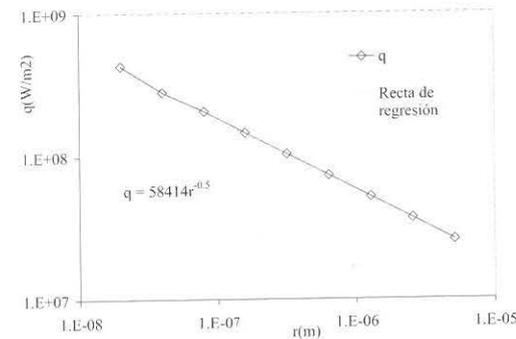


Fig. 8. Evaluación del término singular de q .

La excelente concordancia de los resultados numéricos del MEC con las características de la solución analítica conocidas a-priori permite suponer que estos resultados numéricos aproximan adecuadamente T y q del problema planteado.

5.- CONCLUSIONES

Se ha presentado la formulación teórica (los núcleos integrales y la Ecuación Integral de Contorno correspondientes) y la implementación de un código del Método de los Elementos de Contorno (MEC) con los elementos lineales continuos para los problemas de flujo de calor estacionario en varios sólidos anisótropos homogéneos o FGM exponenciales en contacto. Los resultados numéricos demuestran que este código puede ser muy útil en el estudio de los revestimientos térmicos de tipo FGM, en particular en presencia de fallos de tipo despegue - grieta, que originan un cambio brusco de resistencia térmica en la interfase y por lo tanto una fuerte perturbación del flujo de calor. El trabajo presentado representa la primera parte del desarrollo en curso de un código del MEC para los problemas termoelásticos en las configuraciones descritas.

En la figura 6 se puede observar el efecto de la grieta, primero en un aumento considerable de la T , alrededor de 260°C , en la cara superior del revestimiento encima de la grieta, y segundo en la evolución del salto de T a lo largo de la grieta de acuerdo con el desarrollo asintótico¹⁰ cuyo primer término es proporcional a la función raíz cuadrada de la distancia al vértice de la grieta.

En la evolución horizontal de q , figura 7, la presencia de la grieta implica una disminución del flujo en la cara superior del revestimiento situada encima de la grieta, y en una singularidad de q en la interfase en el entorno del vértice de la grieta. Esta singularidad se analiza con más detalle en la figura 8, donde se puede ver un acuerdo excelente del orden de singularidad calculado (mediante una regresión lineal de la evolución de q en función de la distancia al vértice de la grieta en escala logarítmica) con el predicho analíticamente¹⁰ (-0.5).

6.- AGRADECIMIENTOS.

Se agradece la ayuda recibida de la Comisión de Intercambio Cultural, Educativo y Científico entre España y los EE.UU. de América (Proyecto del Programa Fulbright N. 99271) y de la DGEIC del Ministerio de Educación y Cultura (Proyecto N. PB98-1118).

7.- REFERENCIAS.

1. Miller T. C. (1998), Finite Element Analysis of a Thermally Loaded Interface Crack in a Ceramic Coating. *Engineering Fracture Mechanics*, Vol. 59, N° 2, pp 203-214.
2. Proceedings of the 6th International Symposium on Functionally Graded Materials (FGM2000), Estes Park, Colorado, USA, Sept. 2000 (in press).
3. Lee Y-D., Erdogan F. (1998), Interface Cracking of FGM Coatings under Steady-State Heat Flow. *Engineering Fracture Mechanics*, Vol. 59, N° 2, pp 361-380.
4. Paris F., Cañas J. (1997), *Boundary Element Method. Fundamentals and Applications*, Oxford University Press.
5. Mantič V., Paris F. (1995), On Free Terms and Singular Integrals in Isotropic and Anisotropic Potential Theory. *Computational Mechanics* 95, Atluri S. N., Yagawa G., Cruse T. A., Springer, pp. 2806-2811.
6. Núñez J. P. (2000), Análisis del Problema Térmico con Contacto para Medios Anisótropos con Variación Gradual de las Propiedades mediante el Método de los Elementos de Contorno, Proyecto Fin de Carrera, ESI, Universidad de Sevilla.
7. Clements D. L., Budhi W. S. (1999), A Boundary Element Method of the Solution of a Class of Steady-State Problems for Anisotropic Media. *J. Heat Transfer*, Vol. 121, pp. 462-465.
8. Berger, J. R., Martin P. A., Mantič V., Gray L. J., Fundamental Solutions for Steady-State Heat Transfer in an Exponentially-Graded Anisotropic Material (submitted for publication).
9. Gray L. J., Kaplan T., Richardson J. D., Paulino G. H., Green's Functions and Boundary Integral Equations for Functionally Graded Materials: Heat Conduction, *J. Applied Mechanics* (in press).
10. Mantič V., Paris F., Berger J., Singularities in 2D Anisotropic Potential Problems in Multimaterial Corners. Real Variable Approach (submitted for publication).