

UNIVERSIDAD SAN FRANCISCO DE QUITO USFQ

Colegio de Ciencias e Ingenierías

**Modelado Termo-Mecánico de Recubrimiento Multicapas y
Multimaterial para Barreras Térmicas en Turbinas a Gas**

Trabajo de Investigación

Andrés Paolo Carphio Martínez

Ingeniería Mecánica

Trabajo de titulación presentado como requisito
para la obtención del título de
Ingeniero Mecánico

Quito, 14 de diciembre de 2018

UNIVERSIDAD SAN FRANCISCO DE QUITO USFQ
COLEGIO DE CIENCIAS E INGENIERIA

**HOJA DE CALIFICACIÓN
DE TRABAJO DE TITULACIÓN**

Modelado Termo-Mecánico de Recubrimiento Multicapas y Multimaterial para
Barreras Térmicas en Turbinas a Gas

Andrés Paolo Carphio Martínez

Calificación:

Nombre del profesor, Título académico

Alfredo Valarezo, Ph.D

Firma del profesor

Quito, 14 de diciembre de 2018

Derechos de Autor

Por medio del presente documento certifico que he leído todas las Políticas y Manuales de la Universidad San Francisco de Quito USFQ, incluyendo la Política de Propiedad Intelectual USFQ, y estoy de acuerdo con su contenido, por lo que los derechos de propiedad intelectual del presente trabajo quedan sujetos a lo dispuesto en esas Políticas.

Asimismo, autorizo a la USFQ para que realice la digitalización y publicación de este trabajo en el repositorio virtual, de conformidad a lo dispuesto en el Art. 144 de la Ley Orgánica de Educación Superior.

Firma del estudiante: _____

Nombres y apellidos: Andrés Paolo Carphio Martínez

Código: 00122628

Cédula de Identidad: 0603880436

Lugar y fecha: Quito, 14 de diciembre de 2018

DEDICATORIA

A mis Padres, Francisco y María

A lo máspreciado que tengo en la vida, Nicole y Emilio

RESUMEN

En este estudio varias configuraciones multicapa, basadas en el sistema YSZ-GDZ, se investigan mediante un modelo termo-mecánico con el fin de investigar la viabilidad en términos de durabilidad (distribución de esfuerzos) y de funcionalidad (conductividad térmica) bajo condiciones térmicas. Para lograr lo anterior, dos modelos numéricos son desarrollados, empleando la técnica acoplada de dos softwares de elementos finitos, *Object oriented finite element (OOF) analysis software*, para generar una malla de elementos finitos, y ABAQUS para el análisis termo-mecánico bidimensional. Para el primero modelo, se encontró los beneficios en la reducción de la conductividad térmica a través de la sustitución por capas porosas de baja conductividad, ya sea de GDZ o YSZ. Para el segundo modelo, se encontró que los esfuerzos en las regiones cercanas a la interfaz de las capas cerámicas resultan de la diferencia entre los coeficientes de expansión térmica, en el cual el efecto de la presencia de poros y grietas verticales también es observado. Los modelos numéricos están basados en el estudio experimental del grupo de Sampath del centro de investigaciones de termo-rociado de la Universidad de Stony Brook.

Palabras Clave: Recubrimientos de Barrera térmica, Esfuerzos residuales, Conductividad térmica efectiva, YSZ, GDZ, Elementos finitos, ABAQUS, OOF2, Multicapa cerámica (MCL).

ABSTRACT

In this study several multilayer configurations, based on the YSZ-GDZ system, are investigated by a thermo-mechanical model in order to investigate the feasibility in terms of durability (stress distribution) and functionality (thermal conductivity) under thermal conditions. To achieve the above, two numerical models are developed, using the coupled technique of two finite element softwares, Object oriented finite element (OOF) analysis software, to generate a finite element mesh, and ABAQUS for two-dimensional thermo-mechanical analysis. For the first model, the benefits in reducing thermal conductivity were found by replacing porous layers with low conductivity, either GDZ or YSZ. For the second model, it was found that the stresses in the regions near the interface of the ceramic layers result from the difference between the coefficients of thermal expansion, in which the effect of the presence of pores and vertical cracks is also observed. The numerical models are based on the experimental study of the Sampath group of the center for thermal spray research of Stony Brook University.

Keywords: Thermal barrier coatings, Residual stresses, Effective thermal conductivity, YSZ, GDZ, Finite elements, ABAQUS, OOF2, Multi ceramic layer (MCL).

TABLA DE CONTENIDOS

INTRODUCCION	13
MÉTODOS	21
Generación de malla	21
Modelado de elementos finitos	24
Conductividad térmica efectiva.	24
Esfuerzos Térmicos.	27
RESULTADOS Y DISCUSIONES	35
Conductividad Térmica Efectiva	35
Esfuerzos Residuales	39
CONCLUSIONES	64
REFERENCIAS	66
ANEXO A: CODIGO PYTHON – ABAQUS	69

ÍNDICE DE TABLAS

Tabla 1. Propiedades Termo-Mecánicas de todos los materiales.....	30
---	----

ÍNDICE DE FIGURAS

Figura 1. Configuración de Recubrimiento de un Alabe de Turbina a Gas.	14
Figura 2. Esquema de la configuración de TBC multicapa compuesto por capas YSZ Y GDZ...	15
Figura 3. Ilustraciones esquemáticas de diferentes configuraciones de múltiples capas de TBCs. Representación de los modos / ubicaciones de falla de FCT observados para las variantes de múltiples capas ensayadas y sus Imágenes SEM asociados de sección transversa...	16
Figura 4. Proceso de Mallado de las configuraciones MC a) TBC_B b) TBC_C c) TBC_C.	24
Figura 5. Diagrama de flujo para la simulación numérica.	25
Figura 6. Condiciones de Contorno.....	27
Figura 7. Diagrama de Flujo Esfuerzos Residuales.....	29
Figura 8. Comportamiento plástico del BC (NiCoCrAlY) y Sustrato (Inconel 617).....	31
Figura 9. Configuraciones Multicapa (MCL).....	32
Figura 10. Condiciones de Contorno a) Mecánicas; b) Térmicas (Ciclos Térmicos).	34
Figura 11. Conductividad Térmica Efectiva As-Sprayed de configuraciones multicapa, comparación de resultados experimentales y predicciones numéricas FEM.	35
Figura 12. (a) Flujo de Calor Vertical, (b) Imagen SEM_B.....	37
Figura 13. Contornos de temperatura de MCLs, sujetos a gradeinte termico de 350 ° C.	39

Figura 14. Distribución de esfuerzos in-plane configuración B, Después de calentamiento 1000 ° C (a), Enfriamiento 25 ° C (b) y Diferentes puntos trazados a lo largo de las interfases (c).....	44
Figura 15. Distribución de esfuerzos in-plane a lo largo de la distancia horizontal configuración B, Interfaz GDZ-Poroso/YSZ-Denso (a), Interfaz YSZ-Denso/TGO (b), Interfaz TGO/BC (c).....	45
Figura 16. Path_1, Path_2 y Path_3, trazados a lo largo de la distancia vertical MCL_B.....	46
Figura 17. Distribución y comparación de esfuerzos in-plane a lo largo de la distancia vertical configuración B en caminos Path_1, Path_2 y Path_3, después del calentamiento y enfriamiento.....	46
Figura 18. Distribución y comparación de esfuerzos out-of-plane a lo largo de la distancia vertical configuración B en caminos Path_1, Path_2 y Path_3, después del calentamiento y enfriamiento.....	47
Figura 19. Distribución y comparación de esfuerzos in-plane a lo largo del Path_2, durante calentamiento (a) y durante el enfriamiento (b) a diferentes temperaturas.....	48
Figura 20. Distribución y comparación de esfuerzos out-of-plane a lo largo del Path_2, durante calentamiento (a) y durante el enfriamiento (b) a diferentes temperaturas.....	49
Figura 21. Distribución de esfuerzos in-plane configuración C, Después de calentamiento 1000 ° C (a), Enfriamiento 25 ° C (b) y Diferentes puntos trazados a lo largo de las interfases (c).....	50

Figura 22. Distribución de esfuerzos in-plane a lo largo de la distancia horizontal configuración C, Interfaz GDZ-DVC/YSZ-Poroso (a), Interfaz YSZ-Denso/TGO (b), Interfaz TGO/BC (c).....	51
Figura 23. Path_1, Path_2 y Path_3, trazados a lo largo de la distancia vertical MCL_C.....	52
Figura 24. Distribución y comparación de esfuerzos in-plane a lo largo de la distancia vertical configuración C en caminos Path_1, Path_2 y Path_3, después del calentamiento y enfriamiento.....	52
Figura 25. Distribución y comparación de esfuerzos out-of-plane a lo largo de la distancia vertical configuración C en diferentes caminos Path_1, Path_2 y Path_3, después del calentamiento y enfriamiento.	53
Figura 26. Distribución y comparación de esfuerzos in-plane a lo largo del Path_2, Durante calentamiento (a) y Durante el enfriamiento (b) a diferentes temperaturas.	54
Figura 27. Distribución y comparación de esfuerzos out-of-plane a lo largo del Path_2, Durante calentamiento (a) y Durante el enfriamiento (b) a diferentes temperaturas.	55
Figura 28. Distribución de esfuerzos in-plane configuración D, Después de calentamiento 1000 ° C (a), Enfriamiento 25 ° C (b) y Diferentes puntos trazados a lo largo de las interfases (c).....	56
Figura 29. Distribución de esfuerzos in-plane a lo largo de la distancia horizontal configuración D, Interfaz GDZ-DVC/YSZ-Denso (a), Interfaz YSZ-Denso/TGO (b), Interfaz TGO/BC (c).....	57

Figura 30. Path_1, Path_2 y Path_3, trazados a lo largo de la distancia vertical MCL_D.	58
Figura 31. Distribución y comparación de esfuerzos in-plane a lo largo de la distancia vertical configuración D en caminos Path_1, Path_2 y Path_3, después del calentamiento y enfriamiento.....	58
Figura 32. Distribución y comparación de esfuerzos out-of-plane a lo largo de la distancia vertical configuración D en diferentes caminos Path_1, Path_2 y Path_3, después del calentamiento y enfriamiento.	59
Figura 33. Distribución y comparación de esfuerzos in-plane a lo largo del Path_2, durante calentamiento (a) y durante el enfriamiento (b) a diferentes temperaturas.	60
Figura 34. Distribución y comparación de esfuerzos out-of-plane a lo largo del Path_2, durante calentamiento (a) y durante el enfriamiento (b) a diferentes temperaturas.	61

INTRODUCCION

Los recubrimientos de barrera térmica, (TBCs, por sus siglas en inglés), son materiales aplicados en las superficies de los álabes metálicos de los motores de turbina de gas, que permite lograr una mayor eficiencia térmica a través de temperaturas de operación más altas, a esto se suma el beneficio de una mayor vida útil de los alabes de la turbina mediante la reducción de la temperatura del sustrato e incluye la reducción de técnicas de enfriamiento (Clarke, Oechsner, & Padture, 2012). Los sistemas de TBC utilizados para motores a reacción están compuestos de varios componentes (ver Figura 1), que tienen funciones específicas. Una configuración común de TBC consiste en una capa superior (*topcoat*), generalmente compuesta por el cerámico zirconia estabilizada con Itria -(YSZ) que tiene una conductividad térmica relativamente baja, de manera que proporciona aislamiento térmico a los alabes metálicos de la turbina. El recubrimiento intermedio metálico (*bondcoat*), una aleación NiCoAlY que permite la adherencia del TBC al sustrato metálico o de super-aleación de Niquel, además de entregar el aluminio requerido para la oxidación controlada en la interfaz con la capa superior. La capa de óxido relativamente delgada desarrollada térmicamente (TGO) resultante del proceso de oxidación del *bond-coat* (Hille, 2009). Estos recubrimientos son aplicados ya sea por la técnica de *plasma spray* o *electron beam physical vapor deposition*, debido a que las técnicas de deposición de recubrimientos no se encuentran en el alcance del presente estudio, no se abordará a profundidad los detalles de estos.

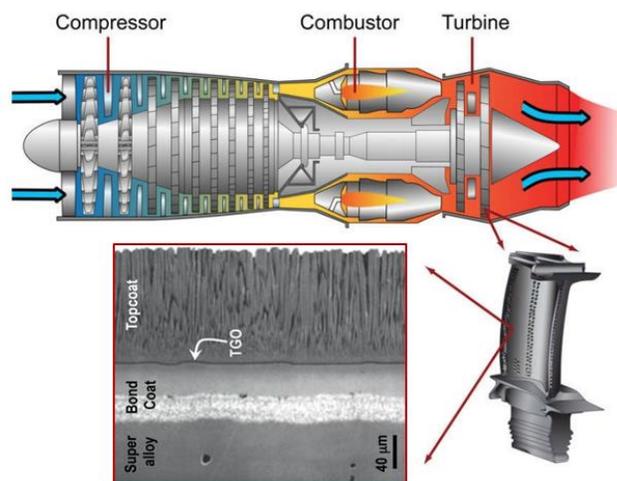


Figura 1. Configuración de Recubrimiento de un Alabe de Turbina a Gas.

Con el aumento de la temperatura de entrada de la turbina, el recubrimiento utilizado actualmente: YSZ (yttria-stabilized zirconia), tiene una capacidad de temperatura limitada ($<1200\text{ }^{\circ}\text{C}$) y se degrada en presencia de depósitos de silicato, obligando al desarrollo de nuevos recubrimientos que permitan el funcionamiento a mayor temperatura y que resistan al ataque de silicatos. De acuerdo con el estudio de Viswanathan, et al. el Zirconato de Gadolinio (Gadolinium Zirconate -GDZ) promete ser un material contendiente emergente, no solo debido a su baja conductividad térmica, pero también por su capacidad para resistir el ataque de depósitos de silicato y a la resistencia al sinterizado. Sin embargo, este material no puede reemplazar directamente al YSZ debido a su incompatibilidad con la capa (TGO), y la baja resistencia a la fractura que este material posee. Por lo cual, apoyados en estudios previos Viswanathan, et al. propone varias configuraciones multicapa y multimaterial, basadas en la combinación de YSZ-GDZ (Figura 3), en las que el recubrimiento se diseñó con el objetivo de cumplir con los requisitos de funcionalidad y de una mayor durabilidad; donde las principales características de resistencia a la erosión, resistencia a la fractura, compatibilidad, entre otras se presentan en la Figura 2.

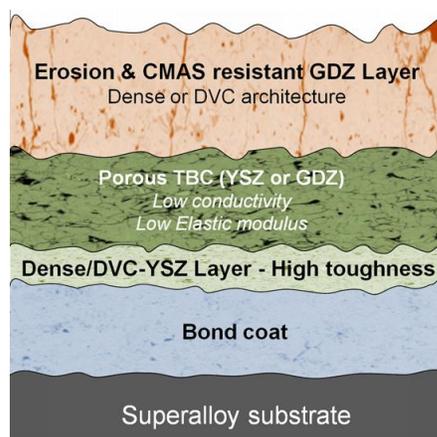


Figura 2. Esquema de la configuración de TBC multicapa compuesto por capas YSZ Y GDZ.

Las nuevas estrategias mostraron una excelente durabilidad a ensayos cíclicos de temperatura con resultados iniciales que indican que la capa GDZ porosa dentro del recubrimiento es propenso a la delaminación cohesiva prematura debido a su menor resistencia a la fractura en comparación con el cerámico YSZ, de igual manera los resultados sugieren que la mayoría de los recubrimientos multicapa ensayados en este estudio presentaron una significativa diferencia a la locación de falla convencional (Interfaz TGO-TopCoat/TGO-BondCoat) como se ilustra en los esquemas representativos y observaciones de las micrografías de secciones transversales después de la falla Figura 3. En el mismo estudio se observaron beneficios sustanciales en la reducción de la conductividad térmica mediante la sustitución por capas porosas de baja conductividad, ya sea de GDZ (recubrimiento B) o YSZ (recubrimiento C) en lugar de arquitecturas con capas DVC. (Viswanathan, Dwivedi, & Sampath, 2015).

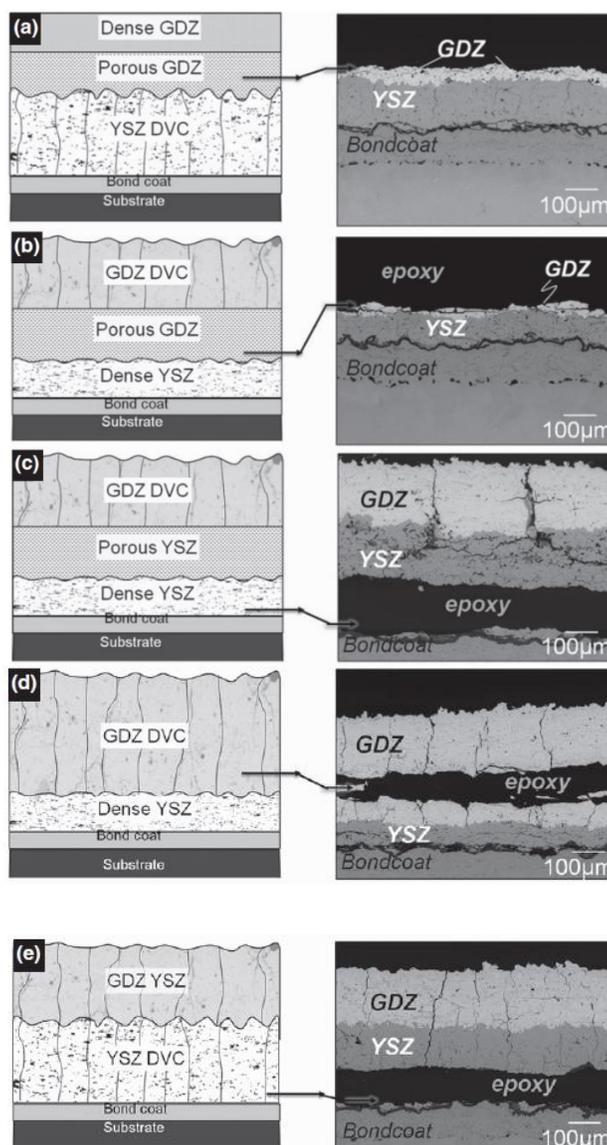


Figura 3. Ilustraciones esquemáticas de diferentes configuraciones de múltiples capas de TBCs. Representación de los modos / ubicaciones de falla de FCT observados para las variantes de múltiples capas ensayadas y sus Imágenes SEM asociados de sección transversal.

Wang et al., 2016, asegura que comprender a profundidad el aislamiento térmico y los mecanismos de falla en TBCs, es vital para evaluar la fiabilidad y durabilidad de estos. Los métodos experimentales en muchos de los casos no pueden reflejar el comportamiento real de los recubrimientos durante su proceso de servicio, debido a que la medición del

comportamiento termo-mecánico a microescala enfrenta dificultades experimentales aplicando métodos de ensayo convencionales, a esto se suma las posibles alteraciones termo físicas que involucra el desarrollo y preparación de las muestras experimentales. De modo que, el modelado de elementos finitos (FEM) juega un papel importante y es ampliamente utilizado en el estudio de este tipo de problemas. Existen muchos estudios computacionales relacionados al comportamiento termo-mecánico de recubrimientos de barrera térmica convencionales, estos son TBCs basados en una sola capa cerámica-YSZ. En el trabajo de Ranjbar-Far et al., se desarrolló un modelo de elementos finitos (FEM) para evaluar los esfuerzos residuales inducidos por ciclos térmicos en un sistema típico de recubrimiento de barrera térmica rociado con plasma, el principal objetivo era determinar la influencia de las propiedades de los materiales constituyentes y del tipo de forma de las interfaces de los materiales, con resultados que indican una estrecha dependencia de los mismos y las posibles ubicaciones de iniciación y propagación de grietas.

Por otro lado, Li et al., presenta el efecto del crecimiento de la capa de óxido (TGO) en el desarrollo de esfuerzos en un recubrimiento de doble capa cerámica LZ-YSZ, donde se encontró que los esfuerzos residuales en las regiones cercanas a la interfaz de las capas cerámicas resultan de la incompatibilidad de la expansión térmica de los materiales y del campo de temperatura no uniforme, en el que el crecimiento de capa de óxido revela un influencia insignificante en el desarrollo de los esfuerzos. Gupta et al. utiliza el método de elementos finitos para evaluar el comportamiento termo-mecánico del recubrimiento, el proceso que se introduce en este estudio se basa en la técnica acoplada de dos softwares, *Object oriented finite element (OOF-2) analysis software*, para generar una malla de elementos finitos, y ABAQUS (Dassault Systèmes Simulia, 2012) para el análisis termo-mecánico. La

técnica fue utilizada para simular el comportamiento de propagación de grietas y para la predicción de vida de los TBCs bajo condiciones reales de servicio.

Los estudios anteriores proporcionan importante información sobre los mecanismos que gobiernan la falla de los TBC convencionales. Sin embargo, hasta el momento existe muy poca literatura con resultados computacionales que proporcionen hallazgos aplicables a los recubrimientos MCL(Multi-Ceramic-Layer), a esto se adiciona la simplificación que han realizado los investigadores en los trabajos anteriores al estudiar modelos de elementos finitos que no consideran la morfología real de las microestructuras de TBCs. De hecho, los mecanismos de falla de este nuevo sistema de recubrimiento aún no se han entendido bien. Debido al empleo de más capas y de la interfaz débil introducida adicionalmente, el patrón de falla y el mecanismo de falla de los recubrimientos MCL son más complejos que los de los recubrimientos convencionales. En consecuencia, el conocer el desarrollo de esfuerzos residuales asociados al ciclo de temperatura que experimentan los recubrimientos en la vida real es esencial para comprender los mecanismos de falla de los recubrimientos MCL.

En cuanto al estudio computacional para la predicción de la conductividad térmica efectiva en TBCs, existen múltiples enfoques, el más común entre estos es la utilización del Software OOF2 desarrollado por el instituto Nacional de Estándares y Tecnología de los Estados Unidos (NIST), el cual facilita la identificación de todas las características morfológicas de las microestructuras para después poder realizar el estudio FEM con un enfoque más real, a esto se suma el beneficio de ser una herramienta gratuita desarrollada en Linux. Con respecto a la gran aplicación del código OOF, Ganvir et al., asegura que el análisis de elementos finitos orientado a objetos (OOF) mostro ser una herramienta eficaz para evaluar

la conductividad térmica de los TBCs, ya que el método es capaz de incorporar la microestructura real en el modelo, esto resulta de la verificación y comparación con resultados experimentales. Langer et al., utilizó este código para realizar cálculos FEM con el fin de estimar las propiedades macroscópicas de los materiales a partir de su microestructura. Por otro lado, Kulkarni et al., completó sus trabajos experimentales con cálculos de FEM de la conductividad térmica efectiva y el módulo de Young realizado en micrografías artificiales, en el caso de recubrimientos de barrera térmica de zirconio parcialmente estabilizados (recubrimientos PSZ TBC) los resultados calculados fueron sobreestimados en comparación con los experimentos realizados.

La importancia del presente estudio radica en el comprender en profundidad la viabilidad de las configuraciones de múltiples capas de TBCs expuestas por Viswanathan, et al., en términos de funcionalidad (Conductividad) y de durabilidad (Distribución de esfuerzos), lo cual lleva a este trabajo a emplear técnicas computacionales de modelado y simulación, para predecir del modelo termo-mecánico y del resultado de los esfuerzos una correlación a la durabilidad de los recubrimientos hechos con al menos 3 diferentes diseños de múltiples capas (Configuraciones B, C Y D ver Figura 3), empleando un modelo en 2D basado en el uso de micrografías transversales reales del recubrimiento, de este modo lograr analizar por simulación los distribución de esfuerzos, y comparar los resultados de la simulación con los resultados experimentales. De igual modo, se pretende desarrollar un modelo capaz de predecir la conductividad térmica efectiva de los 3 diferentes diseños de múltiples capas. Todo lo anterior se pretende lograr mediante la aplicación del método acoplado de softwares de procesamiento de imágenes (OOF2) y de resolución del método de elementos finitos

(ABAQUS) a partir de imágenes de microscopía electrónica de barrido de alta resolución de la microestructura del recubrimiento.

MÉTODOS

El presente trabajo está basado en el estudio experimental de Viswanathan et al., el cual introduce varias configuraciones de TBCs multicapa y multimaterial, basadas en la combinación de YSZ-GDZ. Las características y parámetros introducidos de cada configuración del estudio experimental, son utilizadas para la elaboración de un modelo computacional basado en el método de los elementos finitos. Para esto se implementará una técnica acoplada de dos paquetes computacionales. Para la generación del mallado en 2D de las microestructuras se utilizará el paquete OOF2 (US National Institute of Standards and Technology, Boulder), y para la simulación Termo-mecánica se implementará el paquete de elementos finitos ABAQUS (Dassault Systèmes Simulia, 2012), en este último se desarrolla varios modelos para poder predecir el comportamiento termo mecánico y realizar el cálculo la conductividad térmica efectiva de las microestructuras seleccionadas. El criterio de selección de los tres sistemas de recubrimientos para este estudio se basó en resultados y conclusiones del estudio experimental realizado por Viswanathan et al., donde las configuraciones de multicapas B, C y D (ver Figura 3) presentaron mayor durabilidad y mejoras sustanciales en la reducción de la conductividad térmica.

Generación de malla

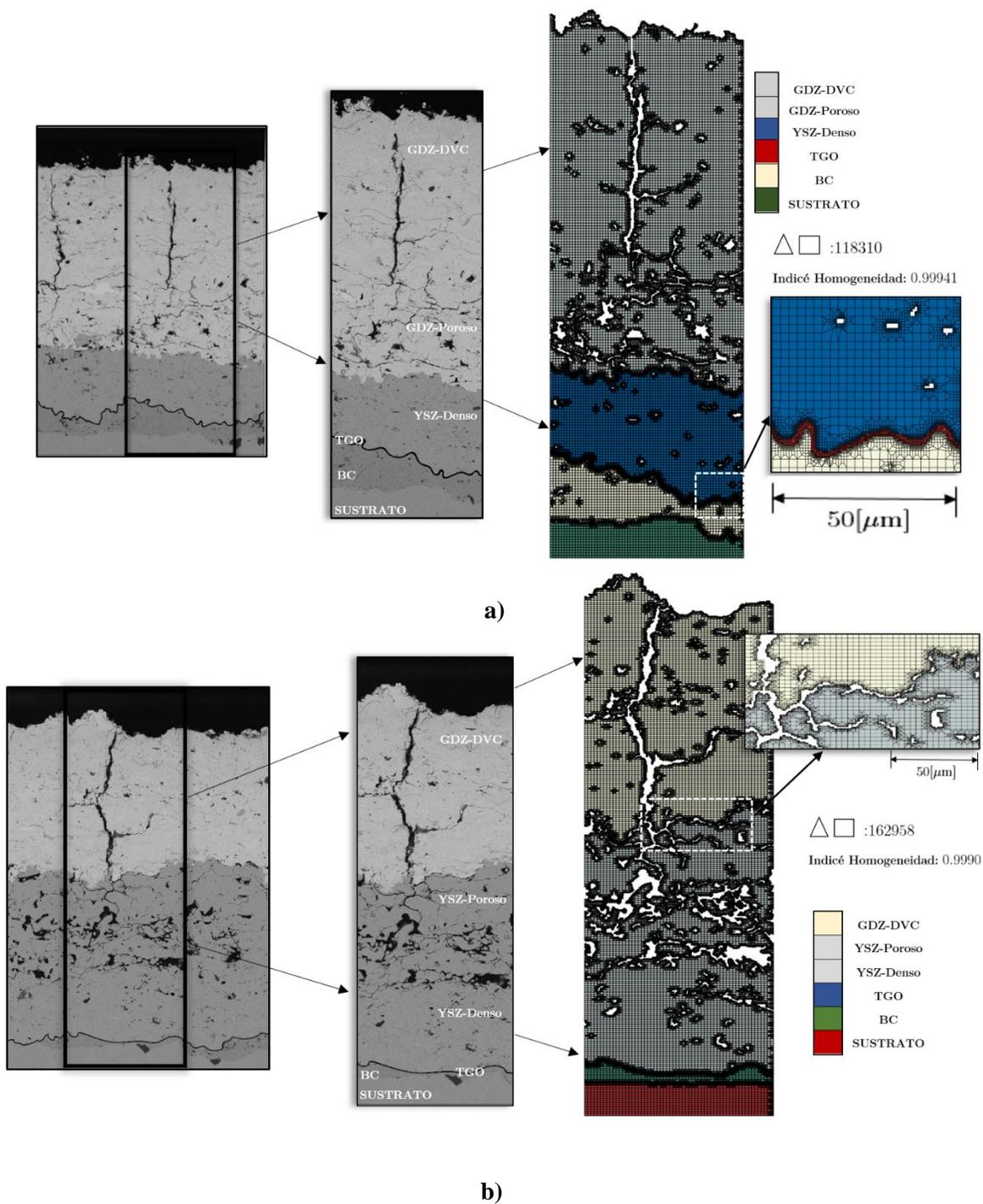
El paquete de elementos finitos orientados a objetos (OOF) es un enfoque de modelado que se usa para determinar las propiedades macroscópicas de imágenes bidimensionales de microestructuras reales, incorporando así las características microestructurales en el modelo (Gupta et al, 2012). El concepto de este enfoque radica en la descomposición de una micrografía digital de la microestructura TBC, en una imagen que presenta y proporciona

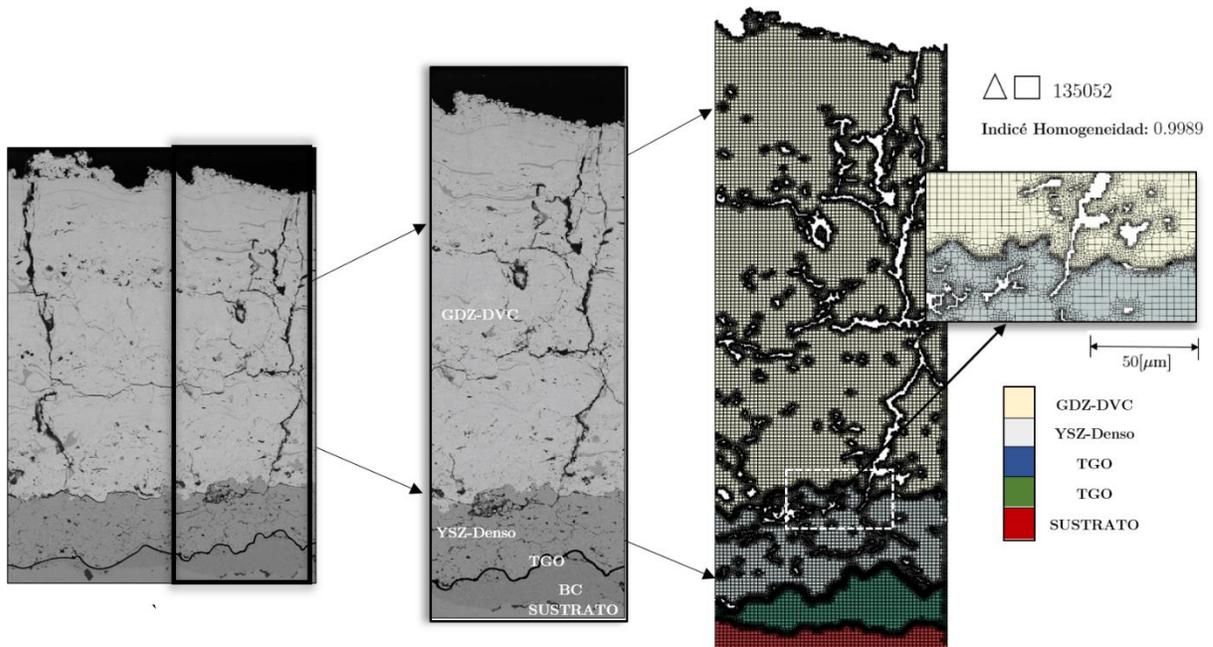
información de las características principales de la microestructura; es decir, la porosidad, grietas y distribución de fases o *splats* dentro de la muestra. En el presente estudio OOF2 en su versión 2.1.14 se utilizó para generar una malla de elemento finitos.

Antes de la generación de la malla, las imágenes de las micrografías fueron procesadas en el editor Adobe Ilustrador, con la finalidad de predefinir y agregar la capa TGO para lograr los espesores deseados de las capas individuales y el cual permite entregar un acercamiento más real en el estudio del presente proyecto. Con el fin de reducir el tiempo de operación computacional se escogió un modelo representativo dentro de la imagen de la microestructura, capaz de representar las características principales del recubrimiento, este proceso se ilustra en la Figura 6. En el proceso de mallado, los elementos se refinan y los nodos se mueven para que las interfaces entre los materiales este bien definidas. Elementos más finos (0.10-0.30 μm) se generan cerca de las interfaces entre materiales para un mejor acercamiento al modelo real y para mejorar la precisión de los resultados. Los elementos mal formados también se arreglan durante el proceso de mallado, con el objetivo de capturar los pequeños detalles de las imágenes de la microestructura real. Con el fin de optimizar el proceso un código en Python se generó para automatizar los pasos para la generación de mallas para las tres microestructuras seleccionadas (Anexo A).

Mallas de elementos cuadrangulares mixtos de 4 nodos y triangulares de 3 nodos fueron construidos. Las mallas se refinaron hasta que el índice de homogeneidad (que indica la capacidad de la malla para reproducir la microestructura), fue de ≥ 0.98 . Las mallas constan de 110.000-170.000 elementos (ver Figura 6). Las mallas generadas se exportaron desde OOF2 en un formato compatible para ABAQUS. En este último caso un código en Python fue

desarrollado para poder optimizar el proceso de exportación e implementación de todos los parámetros necesarios para el desarrollo del modelo de elementos finitos FEM (Anexo A).





c)

Figura 4. Proceso de Mallado de las configuraciones MC a) TBC_B b) TBC_C c) TBC_C.

Modelado de elementos finitos

Conductividad térmica efectiva.

Descripción del modelo.

Para la predicción de la conductividad térmica efectiva de los sistemas de recubrimientos MCL, el uso de la técnica acoplada OOF2-ABAQUS es utilizada para resolver la ecuación de transferencia de calor en un dominio de dos dimensiones. Un análisis térmico bidimensional en estado estable es aplicado. Elementos de transferencia de calor tipo DC2D4 Y D2DC3 son utilizados en ABAQUS. Los diferentes pasos del procedimiento numérico se ilustran en el diagrama de flujo en la figura 5. Es importante señalar que para este tipo de

análisis las mallas de elementos finitos en poros y grietas son considerados para poder asignar las propiedades térmicas necesarias con el fin de analizar la influencia de estos.

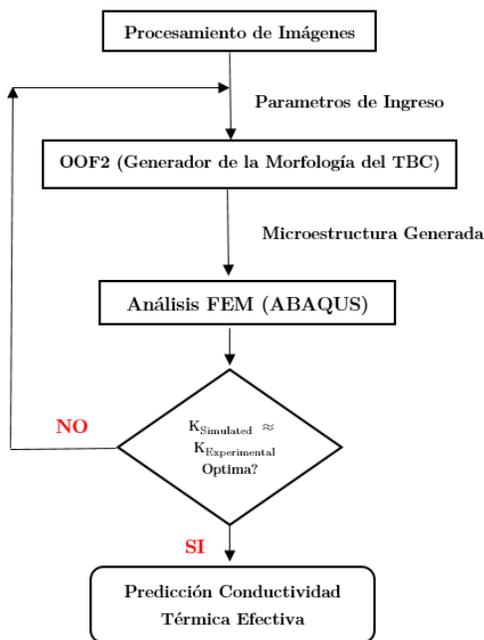


Figura 5. Diagrama de flujo para la simulación numérica.

Las condiciones de transferencia de calor por convección dentro de los poros y grietas pueden ser despreciadas para aplicaciones de rociado con plasma en TBCs, ya que su influencia es significativa cuando los poros son muy grandes o si la presión del gas durante la operación es muy alta (Golosnoy, Cipitria, & Clyne, 2009). Del mismo modo, el efecto Knudsen (Qiao, Bolot, Liao, & Coddet, 2013) no se tomó en cuenta al considerar la conductividad térmica del aire dentro de los poros y grietas. La transferencia de calor por radiación en TBCs rociados con plasma se vuelve significativa solo a temperaturas superiores a los ~1500 K. Por lo tanto, en este análisis, solo se considera el efecto de la transferencia de calor por conducción, ya que el ciclo de temperatura será solo hasta 673 K (400°C) en el lado

caliente, y 323 K (50°C) en lado frío. Las propiedades “Bulk” de conductividad térmica para los dos materiales cerámicos y para el aire son utilizados, en este modelo se empleó 1.6 W/m-K para el cerámico GDZ (Mazilin, 2017), 2.5 W/m-K para el cerámico YSZ y 0.025 W/m-K para las porosidad y grietas (Tan, Longtin, & Sampath, 2006).

Posteriormente se aplican las condiciones de contorno como se muestra en la Fig. 6. Luego se analizaron los modelos y se calculó el flujo calor a través de la sección transversal con ABAQUS. El valor de la conductividad térmica efectiva para los tres modelos de MCL se calculó resolviendo la ley de conducción de calor de Fourier (Ganvir et al., 2017):

$$Q = \frac{\Delta T}{H} K_y [w/m^2] \quad (1)$$

La diferencia de temperatura entre las dos isothermas tendrá influencia en el flujo calor, pero no en el resultado de la conductividad térmica. Por esta razón, el gradiente de temperatura puede configurarse con valores distintos, con el fin de comprobar la continuidad de los resultados esperados. El modelo calcula el flujo de calor vertical de cada elemento para la predicción de la conductividad térmica efectiva a través del grosor total (through-thickness thermal conductivity). El cálculo resulta de un promedio del flujo de calor vertical de cada elemento (Tan et al., 2006).

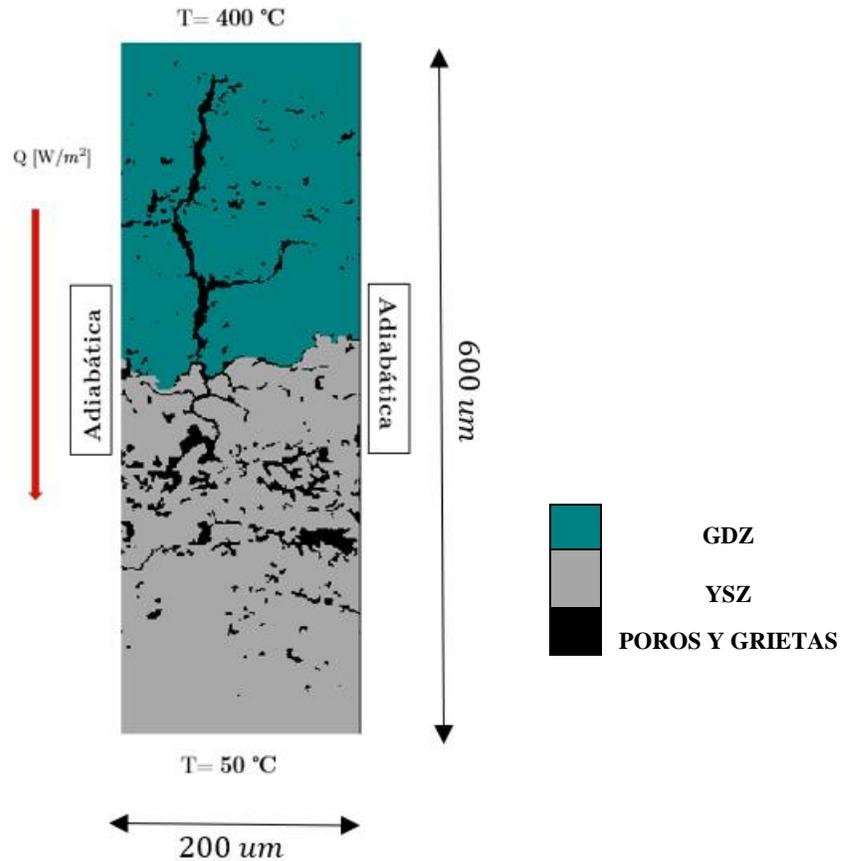


Figura 6. Condiciones de Contorno.

Esfuerzos Térmicos.

Descripción del modelo.

Con el fin de obtener simulaciones más realistas en la distribución de esfuerzos en TBCs, el presente estudio utiliza geometrías de microestructuras reales, considerando todas sus características morfológicas. El proceso y método empleado para la generación de las mallas de elementos finitos que consideran estas características se describe en secciones anteriores. Una vez generadas las mallas en OOF2, se utiliza el software ABAQUS e “Input-

Files” y juntamente con Python se escribe un programa para poder controlar todos los parametros y materiales necesarios para garantizar la convergencia del modelo. En esta investigación, propiedades termo-físicas y mecánicas dependientes de la temperatura e isotrópicas de cada uno de los materiales constituyentes del TBC son consideradas. Un modelo termo-mecánico en estado térmico transitorio es considerado dentro del cual se induce una distribución de temperatura homogénea (Ranjbar-Far, Absi, Mariaux, & Shahidi, 2010). El crecimiento de la capa de óxido de aluminio “TGO growth” no es considerado en el modelo numérico.

Un incremento de tiempo muy pequeño en el orden de 10^{-6} s es necesario durante los pasos de calentamiento y enfriamiento del ciclo térmico para obtener convergencia de la solución. Así mismo, un incremento controlado por un cambio de temperatura máximo permisible en el orden de 20 es requerido (Ranjbar-Far, Absi, Mariaux, & Dubois, 2010). La convergencia del modelo se obtiene repitiendo el cálculo con incrementos de tiempo cada vez menores, así como asegurando la continuidad de la distribución de esfuerzos residuales entre los materiales constituyentes hasta que sean satisfechos. Los diferentes pasos del procedimiento numérico se ilustran en el diagrama de flujo de la Figura 7.

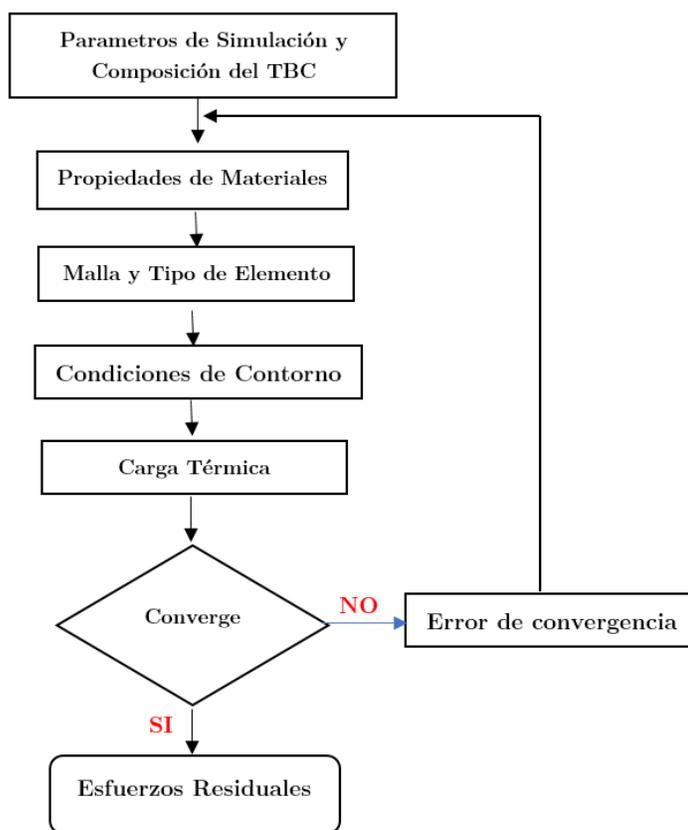


Figura 7. Diagrama de Flujo Esfuerzos Residuales.

En todas las simulaciones, el ancho del modelo es de $L=200\mu\text{m}$. Los espesores promedio de los cerámicos GDZ, YSZ son de $300 - 400\mu\text{m}$. Por otro lado, el BC y Sustrato tiene un espesor promedio de $100- 150 \mu\text{m}$. El grosor del TGO se establece en $3-4 \mu\text{m}$ en todas las configuraciones. Las interfaces de las capas de los recubrimientos se modelan con geometrías y morfologías reales con el fin de representar su rugosidad (ver Figura 9).

Los sistemas TBCs están compuestos por el sustrato de super aleación de Nickel – Inconel 617, una capa intermedia o “BondCoat” de NiCoCrAlY, una capa de óxido de aluminio Al_2O_3 y de capas cerámicas (MCL) compuestas por GDZ y YSZ, la composición de los TBCs se basa en las configuraciones que se muestran en la Figura 9. Los cerámicos GDZ,

YSZ y la capa de óxido de aluminio (TGO) son tratados como materiales puramente elásticos (Li et al., 2017). Mientras que los materiales que constituyen el sustrato y la capa intermedia (BC) son considerados elásticos y plásticos, cuyas propiedades termo-mecánicas se presenta en la Tabla 1. La figura 8. muestra el comportamiento plástico de los metales BC (NiCoCrAlY) y Sustrato (Inconel 617), a través de las curvas esfuerzo-deformación. Los datos son necesarios para perfeccionar el modelo numérico.

Tabla 1. Propiedades Termo-Mecánicas de todos los materiales.

	T, °C	E, GPA	Poisson Ratio	$\alpha \times 10^{-6}, ^\circ\text{C}^{-1}$	$\rho, \text{kg}/\text{m}^3$	k, W/m K	C, J/kg K
GSZ	25
	400	19.42	0.25	9.81	6993	0.64	440
	800	18.30		10.87	6993	0.56	440
	1000	17.74		11.07	6993	0.57	440
YSZ	25
	400	42.26	0.2	10.98	5400	1.12	576
	800	41.48		11.78	5400	1.07	673
	1000	39.21		11.91	5400	1.15	...
TGO	25	380	0.27	5.1	3978	25.2	857
	400	353		...	3978		857
	800	338		9	3978		857
	1000	312		9.8	3978		857
BC	25	183	0.3	...	7320	4.3	501
	400	152		12.5		6.4	592
	800	109		14.3		10.2	781
	1000	...		16		16.1	764
Sustrato	25	211	0.3	12.6	8220	11.5	431
	400	188		14		17.3	524
	800	157		15.4		23.8	627
	1000	139		16.3	

Nota. Los datos fueron recuperados desde: (Bakan, Mack, Mauer, & Vaßen, 2014); (Bakan, n.d.) ; (Aktaa, Sfar, & Munz, 2005)(Widjaja, Limarga, & Yip, 2003b); (Białas, 2008)

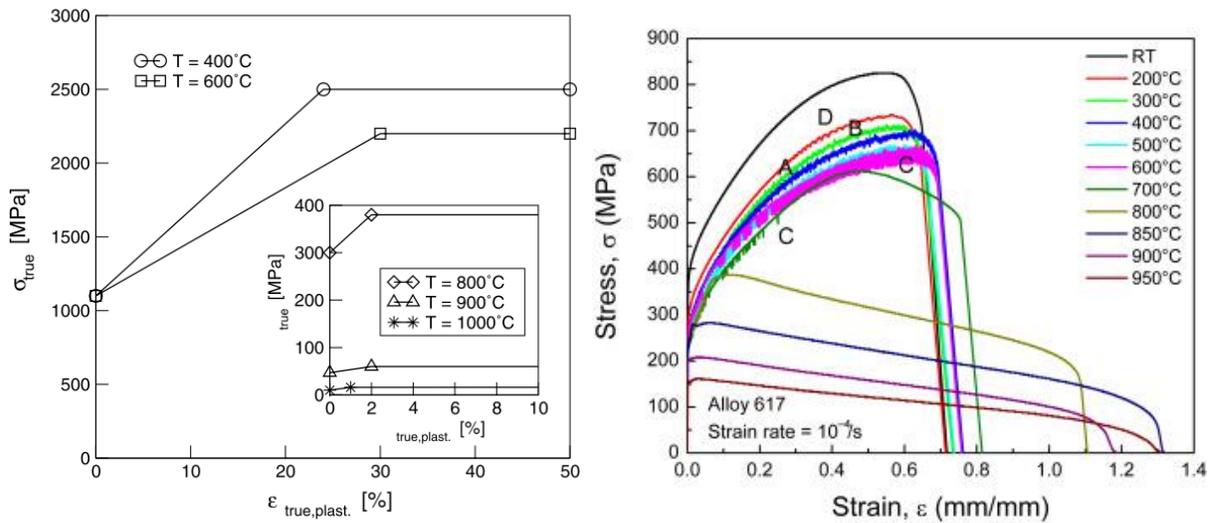


Figura 8. Comportamiento plástico del BC (NiCoCrAlY) y Sustrato (Inconel 617). Recuperado desde (Aktaa et al., 2005).

Como se mencionó anteriormente, el estudio de elementos finitos fue realizado en ABAQUS. Debido a que la dimensión perpendicular a la sección transversal con respecto a las otras dos direcciones es mucho mayor, la aproximación “plane strain” es utilizada. Las mallas constan de alrededor de 110.000-170.000 elementos (ver figura), donde dos tipos de elementos son utilizados: CPEG8T (Elementos cuadráticos de 8 nodos con aproximación “plane strain” generalizada) y CPEG6MT (Elementos cuadráticos de 6 nodos con aproximación “plane strain” generalizada) (Dassault Systèmes Simulia, 2012). Es importante señalar que la forma cuadrática de los elementos proporciona una interpolación de orden superior para el campo de desplazamientos, en consecuencia una distribución más exacta de esfuerzos y deformaciones (Ranjbar-far, Absi, Mariaux, & Smith, 2011).

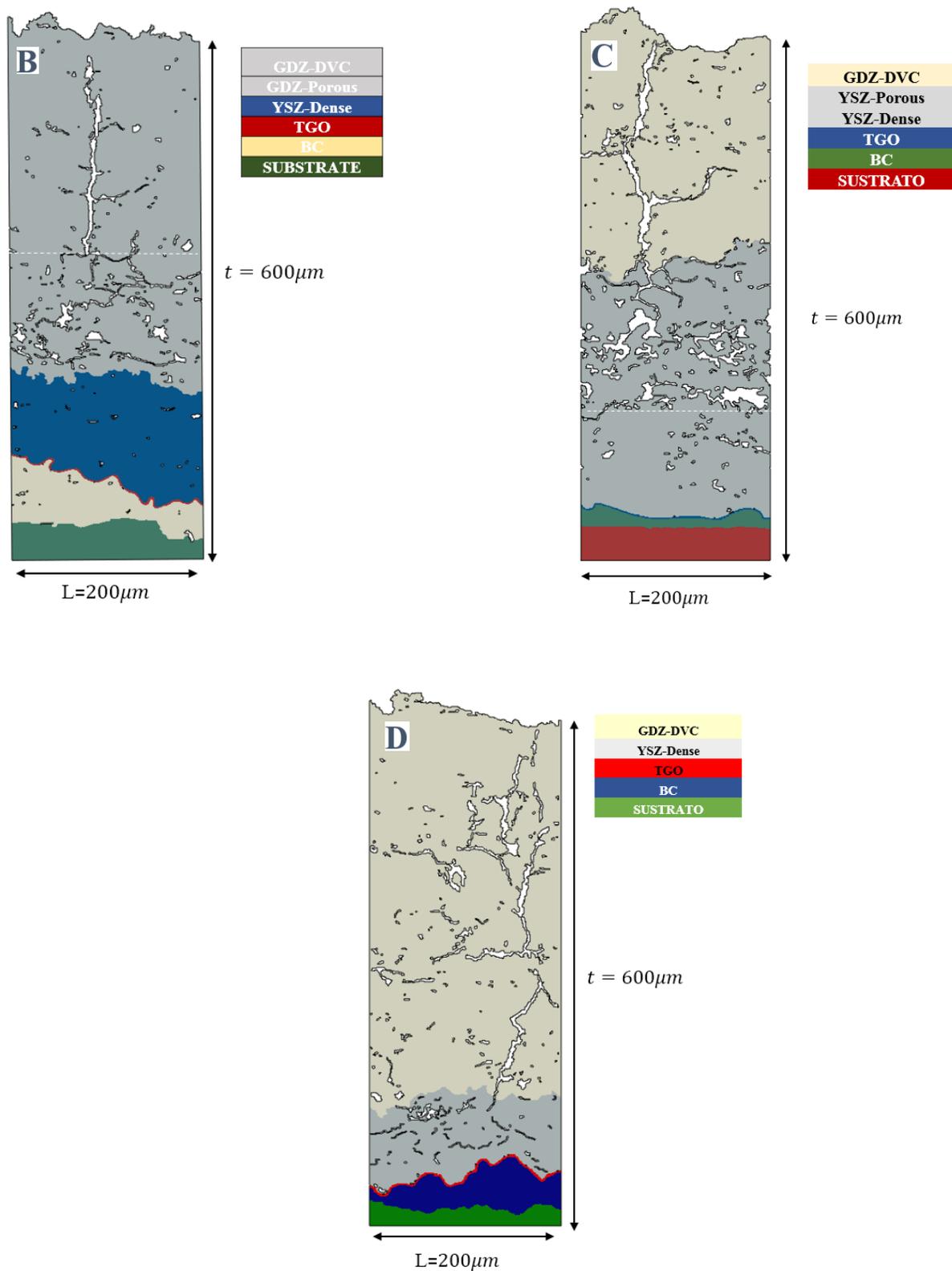
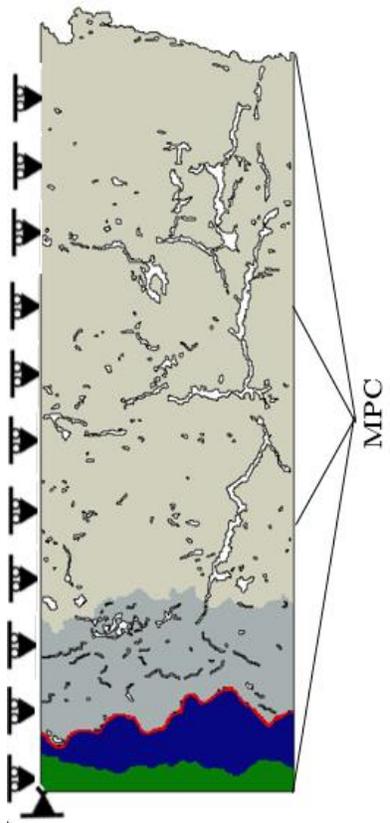


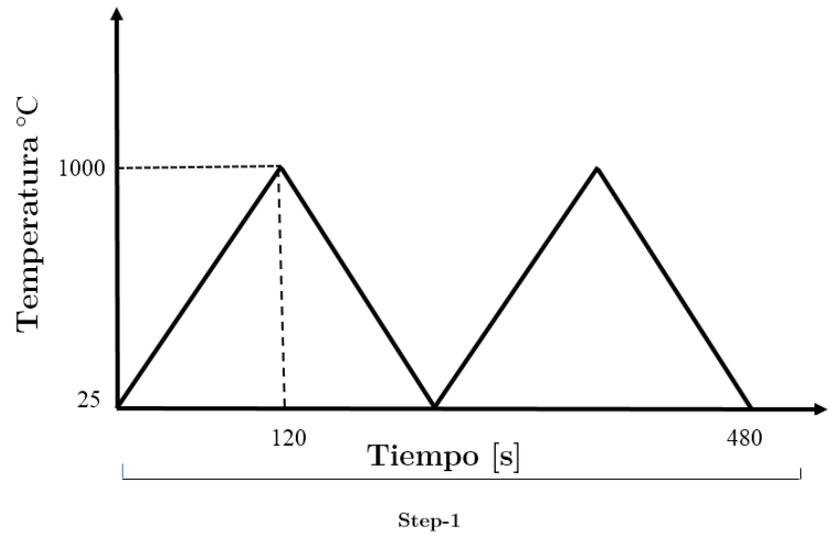
Figura 9. Configuraciones Multicapa (MCL).

Condiciones de contorno y carga térmica.

A fin de lograr la máxima precisión en la simulación, dos condiciones mecánicas de borde son empleadas. Con el fin de eliminar el efecto del borde y aislar la zona investigada de las otras de todo el sistema de recubrimiento, una condición de borde periódica es impuesta en la parte derecha del modelo mediante el empleo de la restricción de múltiples puntos (MPC) disponible en ABAQUS. Esta condición permite que los nodos afectados de la malla se muevan libremente pero simultáneamente en la dirección horizontal. Al mismo tiempo, su desplazamiento en la dirección vertical es posible. El desplazamiento horizontal en la parte izquierda del modelo se cancela para obtener una condición simétrica (Song, Li, Yang, Qi, & Shi, 2018). Además de las condiciones de contorno anteriores, condiciones de contorno térmicas son también requeridas. La carga térmica de los TBCs consistió en imponer una temperatura homogénea en todo el sistema siguiendo el ciclo térmico de la Figura 10. La carga consta de dos ciclos térmicos simulados en un solo step (Step-1). El primero, calentando desde 25 °C hasta 1000 °C en un tiempo de 120 s, seguido del enfriamiento del modelo desde 1000 °C hasta 25°C en 120 s y para el segundo ciclo térmico la carga térmica es idéntica a la anterior. Se asume que el sistema de recubrimientos está inicialmente libre de esfuerzos a 25 °C. Es importante resaltar que al no existir un comportamiento visco-plástico (deformación plástica dependiente del tiempo) de los materiales, no hay necesidad de simular más de dos ciclos térmicos porque cada ciclo adicional reproducirá exactamente lo resultados del segundo ciclo (Bäker & Seiler, 2017).



a)



b)

Figura 10. Condiciones de Contorno a) Mecánicas; b) Térmicas (Ciclos Térmicos).

RESULTADOS Y DISCUSIONES

Conductividad Térmica Efectiva

Los valores de conductividad térmica obtenidos mediante simulación se muestran en la Fig. 11., junto con sus valores de conductividad térmica experimentales. Todas las configuraciones mostraron la misma tendencia que el valor medido para la conductividad térmica. Esto indica que el método que se ha utilizado para esta predicción de conductividad térmica es lo suficientemente capaz de captar las diferentes características microestructurales y clasificar los recubrimientos según su valor de conductividad térmica.

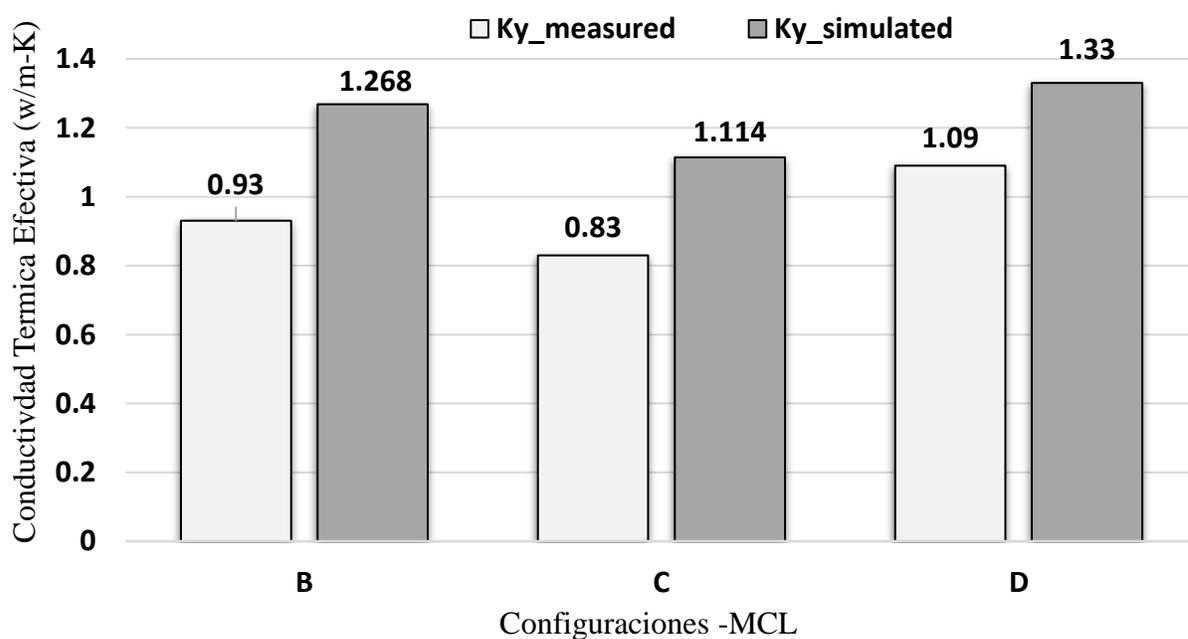


Figura 11. Conductividad Térmica Efectiva en condición as-sprayed de configuraciones multicapa, comparación de resultados experimentales y predicciones numéricas FEM.

Es también importante notar que los valores obtenidos mediante la simulación están por encima del valor experimental. Existen varias razones que podrían explicar la predicción sobreestimada de la conductividad térmica. En realidad, el recubrimiento tiene muchas características que pueden afectar la conductividad térmica, como poros, grietas y límites entre capas, las cuales pueden contribuir a disminuir la conductividad térmica (Michlik & Berndt, 2006). Si bien, el modelo utilizado en este estudio pretende captar todas estas características, resulta difícil detectar todas estas debido a la limitación en la resolución imágenes SEM seleccionadas. Imágenes SEM de mayor resolución podrían resultar en un análisis más preciso. Otra razón puede ser la limitación de la geometría 2D del modelo.

En el modelado, las imágenes SEM que se usaron para predecir la conductividad térmica representan solo una pequeña fracción de la sección transversal. Por lo tanto, puede ser que no represente exactamente a toda la microestructura del TBC. Además, las imágenes en 2D no puede representar precisamente a la microestructura 3D del TBC. Esto crea una diferencia entre la conductividad térmica simulada y la experimental. Asimismo, dado que el efecto Knudsen no es considerado, esta simplificación pudo afectar la predicción de la conductividad térmica. También, para la determinación de la conductividad térmica efectiva se utilizó propiedades “bulk” de los cerámicos YSZ y GDZ, las cuales fueron extraídas del estudio de Tan et al. y Mazilin et al. respectivamente, sin embargo, en el estudio de (Torkashvand, Poursaeidi, & Ghazanfarian, 2018) se utilizó el valor de 2.35 W/K-m para el caso de YSZ. Por lo tanto, propiedades “bulk” más exactas ayudaría a disminuir la diferencia entre la simulación y la experimentación.

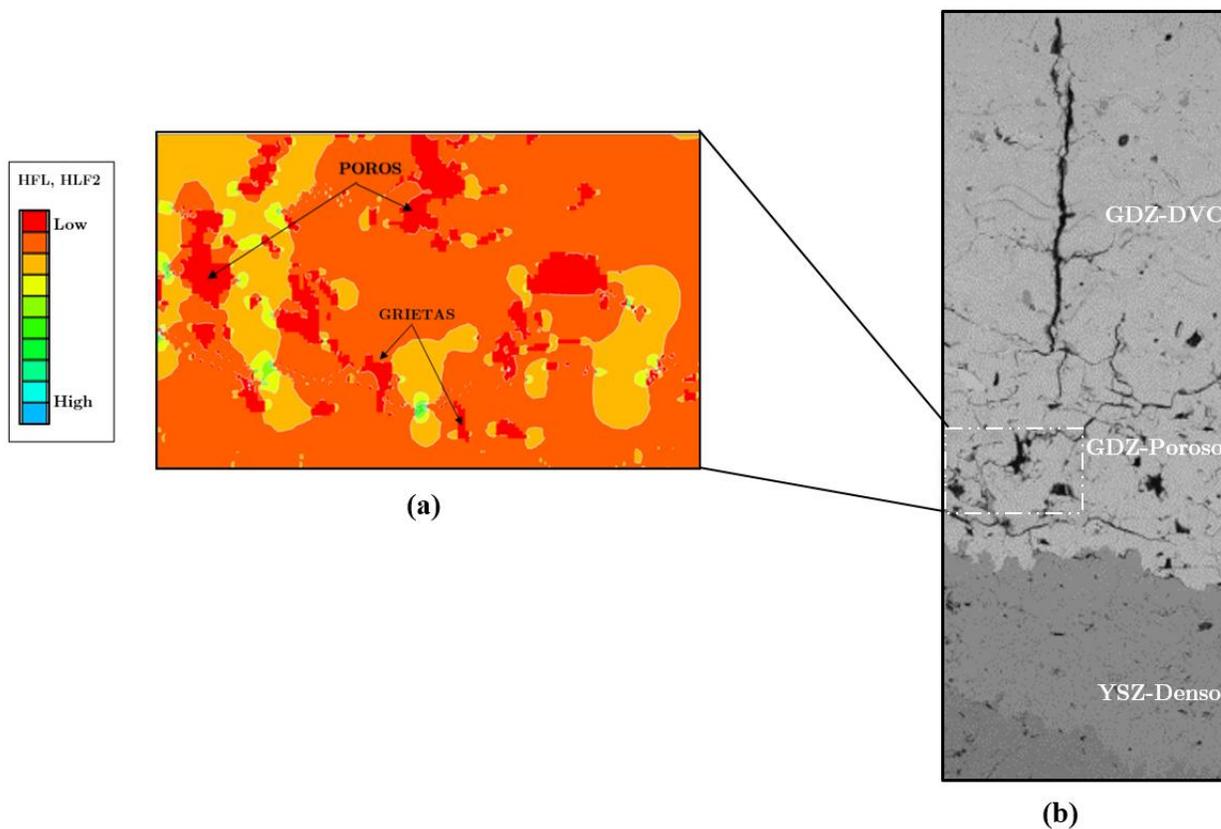


Figura 12. (a) Flujo de Calor Vertical, (b) Imagen SEM_B.

Como consecuencia de la presencia de poros y grietas dentro de la microestructura, el flujo de calor a través de los poros y grietas es bajo debido a la baja conductividad térmica del aire (0.025 W / m-K), mientras que el flujo de calor en el cerámico adyacente a los poros y grietas aumenta. Esto se puede observar comparando la imagen SEM de la micrografía en la Figura 12 (a) y el gráfico de contorno de flujo de calor vertical en la Figura 12 (b).

Cambiando las isoterms para el límite superior e inferior se puede determinar y comprobar el flujo de calor y la conductividad térmica. En la Figura 12 (b), el rojo y anaranjado representan los flujos de calor más bajos y más altos, respectivamente. De la

Figura 12, se ve que los poros y las grietas son importantes para la resistencia térmica: el flujo de calor se reduce donde aparecen los poros y las grietas. Además, en las regiones que se encuentran por encima y por debajo de un poro o grieta, se reduce el flujo de calor; sin embargo, a lo largo de las áreas laterales del poro o grieta el flujo de calor aumenta. Lo anterior comprueba y demuestra los beneficios sustanciales encontrados por (Viswanathan et al., 2015) en la reducción de las conductividades térmicas a través de la sustitución por las capas porosas de baja conductividad, ya sea de GDZ (recubrimiento B) o YSZ (recubrimiento C) en lugar de arquitecturas DVC. Como se esperaba, la arquitectura de recubrimiento con variante DVC de GDZ (recubrimiento D) presentó la conductividad térmica más alta entre este grupo de recubrimientos, lo que se atribuye a la alta densidad del recubrimiento.

En condiciones reales de operación el recubrimiento está expuesto a un el flujo de calor producto del gas caliente que se encuentra en contacto con el sistema TBC, generando un gradiente de temperatura. Considerando un gradiente que varía de 50°C a 400°C . para el límite superior e inferior respectivamente se puede comprobar los resultados de la simulación, los cuales se discuten a continuación. El fenómeno de transferencia de calor en este tipo de estructuras ocurre primordialmente por modo de conducción. La distribución de la temperatura de los sistemas de recubrimiento multicapa de alta temperatura se indica en la Figura 13. Estas distribuciones están en concordancia con los resultados de la conductividad térmica efectiva obtenidos numéricamente, ya que en el caso del recubrimiento tipo B y C la variación de temperatura es alterada en poca medida cerca del TGO y también al identificar que el gradiente térmico es más significativo en las capas cerámicas que en las otras capas constituyentes, lo que indica nuevamente los beneficios en la reducción de las conductividad térmica a través de la sustitución por capas porosas de baja conductividad, ya sea de GDZ

(recubrimiento B) o YSZ (recubrimiento C). Por otro lado, la arquitectura de recubrimiento con variante DVC de GDZ (recubrimiento D) presentó una variación de temperatura mayor cerca del TGO, esto es resultado de la alta densidad de las capas cerámicas.

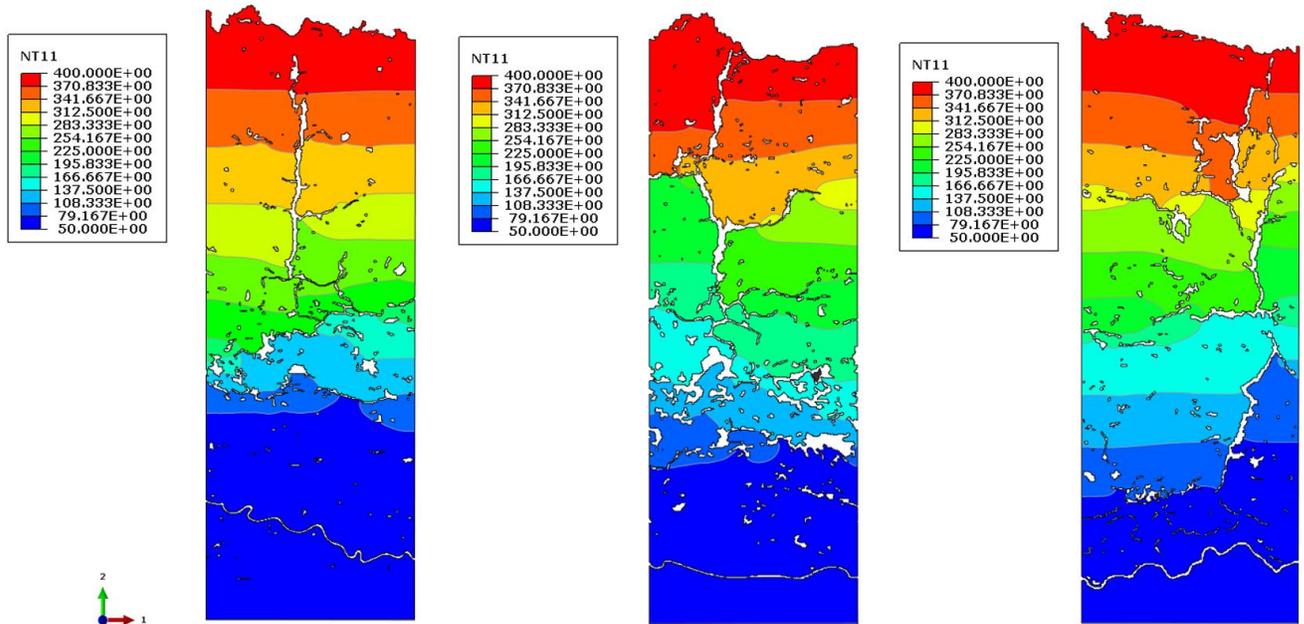


Figura 13. Contornos de temperatura de MCLs, sujetos a gradiente termico de 350°C .

Esfuerzos Residuales

El análisis de esfuerzos residuales en los recubrimientos de barrera térmica con configuraciones multicapa es el enfoque principal de este estudio, con el fin de encontrar la influencia del efecto de las interfases rugosas y del tipo de configuraciones multicapa en la distribución de los esfuerzos. Por consiguiente, se modeló una estructura con grietas y poros utilizando microestructura real como elemento de volumen representativo como se muestra en la Figura 4. Los esfuerzos residuales en recubrimientos de barrera térmica rociados con plasma

se crean debido a muchas razones operativas y metalúrgicas, en general, después de varios ciclos térmicos, los daños en TBC están relacionados con: esfuerzos residuales generados por el proceso de deposición del recubrimiento, las diferencias de los coeficientes de expansión térmica de los materiales constituyentes, oxidación de la capa intermedia (BC), forma compleja de la interfaz cerámico/metal y redistribución de esfuerzos a través de la deformación por creep y deformación plásticas (Bäker & Seiler, 2017).

Ya que los efectos de deposición “quenching stresses” de los TBC no son parte del análisis de este trabajo, el estudio se concentra en los esfuerzos residuales resultantes de ciclos de carga térmica llamados “thermal stresses”. Está bien establecido como evolucionan los esfuerzos en un sistema TBC, si un sistema se calienta desde un estado libre de esfuerzos, la diferencia de la expansión térmica (CTE) causa esfuerzos en la interfaz. Debido a que la interfaz entre los materiales constituyentes es áspera y rugosa, esfuerzos perpendiculares se desarrollan en la interfaz. Los esfuerzos suelen ser mayores en las regiones donde la altura del perfil de rugosidad de la interfaz tiene un máximo en los picos (“peaks”) o un mínimo en los valles (“valleys”)’ ver figura 14. Sin embargo, hay un punto importante sobre los modos de esfuerzo que deben tenerse en cuenta al interpretar los esfuerzos inducidos que se analizan a continuación.

Con respecto a los diferentes modos de esfuerzo, cabe señalar que los esfuerzos (in-plane stresses, $\sigma_{xx}[s_{11}]$) obtienen la misma distribución y tendencia cualitativa en la capa TBC con la distribución de esfuerzos (out-of-plane stresses, $\sigma_{yy}[s_{22}]$), sin embargo, a nivel de magnitud estas pueden variar significativamente. Además, y al igual que las investigaciones realizadas por (Widjaja, Limarga, & Yip, 2003), los resultados de simulación de los esfuerzos

cortantes $\sigma_{xy}[S_{12}]$ muestran que su magnitud tiene valores relativamente mucho más pequeños en comparación con las dos componentes de esfuerzos normales, es decir, σ_{xx} y σ_{yy} . Los esfuerzos normales, causan la falla del sistema TBC mediante el modo I de fractura y, por otro lado, la fractura en modo II se debe a la distribución de los esfuerzos cortantes σ_{xy} (Choi, Zhu, & Miller, n.d.) Debido a lo anterior, poca atención es prestada al estudio del estado esfuerzos cortantes en los recubrimientos de barrera térmica. Para discutir sobre los posibles efectos de las interfases rugosas considerando los factores de distribución de esfuerzos en los TBCs, se puede asegurar que, los mecanismos como la nucleación y propagación de grietas en las interfaces que conducen a la separación “spallation”, se deben principalmente a la presencia de esfuerzos normales. De acuerdo con lo anterior, las componentes de los esfuerzos normales extraídos a partir de simulaciones numéricas se consideran para la interpretación de la respuesta del sistema en ciclos térmicos. Igualmente, el efecto de la presencia de poros y grietas (verticales y horizontales) son interpretados.

Durante el servicio (Step-1), los estados de esfuerzos de los cerámicos “as-sprayed” pueden cambiar debido a la diferencia de coeficientes de expansión térmica de los materiales constituyentes. A continuación, se analiza el efecto de los esfuerzos residuales en el comportamiento de las tres configuraciones (ver Figura 9) de TBC durante el ciclo de operación. Durante la creación de esfuerzos térmicos en el sistema mientras se calienta y se enfría, la diferencia en el coeficiente de expansión térmica entre los materiales cerámicos y el material subyacente causa diferentes distribuciones de esfuerzos, que se distribuyen en diferentes zonas. En las Figuras 14, 21 y 28 se grafican los contornos de esfuerzos in-plane de las tres configuraciones MCL, alrededor de las interfaces en diferentes instantes de la historia

térmica (Después de calentamiento y enfriamiento). Cabe mencionar que, debido a la notable diferencia en las propiedades de los materiales de las diferentes capas, cada capa ha sido presentada con su propia leyenda para representar mejor los contornos de esfuerzo. La distribución tiene una estrecha dependencia al tipo de forma de la interfaz, para poder cuantificar esta dependencia, diferentes puntos a lo largo de la dirección radial de las interfases entre los materiales fueron graficados, como se muestra en la Figura 14, 21 y 28 (c). En general, al analizar la interfaz GDZ/YSZ (Figura 15, 22 y 29. (a)) de las tres configuraciones durante el calentamiento, debido a que el coeficiente de expansión térmica del YSZ es más grande que el del GDZ, la capa YSZ induce esfuerzos a tensión a lo largo de la dirección horizontal de la interfaz en el orden de aprox. 40MPa. Después del enfriamiento, la distribución cualitativa de los esfuerzos sigue siendo la misma pero sus valores en magnitud disminuyen (Figuras 15, 17 y 19 (a)), sin embargo, el signo de esfuerzos es opuesto, donde existe una distribución de esfuerzos en compresión, esto consecuencia de las diferentes tasas de contracción de los cerámicos.

Es interesante notar que al momento del enfriamiento existe una relajación de los esfuerzos normales en todas las configuraciones, sin embargo, en todos los casos existe una reducción de esfuerzos con diferente tendencia cuantitativa, lo cual se puede atribuir a diferentes factores que se discuten a continuación. Una observación importante se encuentra al comparar la distribución de esfuerzos in-plane en la interfaz (GDZ/YSZ) entre las configuraciones B y C al momento del enfriamiento (Figura 15 y 22 (a)), en la cual a nivel de magnitud la distribución es menos significativa en la configuración C, consecuencia del tipo de configuración empleada en la transición de los dos cerámicos, donde a diferencia de la configuración B, en el que se utiliza una transición GDZ Poroso/YSZ Denso, en la

configuración C emplea una transición GDZ-DVC/YSZ-Poroso, resultado de esta combinación la magnitud de los esfuerzos disminuyen, ya que la presencia de configuraciones cerámicas con grietas (verticales) y poros contribuyen a la relajación de esfuerzos al momento contraerse, lo contrario ocurre cuando existe una capa de transición densa (YSZ-Denso). La misma tendencia es observada al comparar la configuración B y D, no obstante, es importante observar la diferencia de la distribución de esfuerzos in-plane al momento del enfriamiento que existe entre el tipo de transición utilizada entre la configuración C y D (Figura 22 y 29 (a)), si bien a nivel de magnitud esta no es significativa, lo anterior comprueba nuevamente la viabilidad al utilizar una transición (GDZ-YSZ) sin involucrar configuración YSZ-Denso. Si el análisis dentro de la interfaz continua, otra diferencia es observada al momento de comparar los esfuerzos out-of-plane en las Figuras 27 y 34 (b) después del enfriamiento entre las configuraciones C y D, concentraciones de esfuerzos en el orden de 14MPa son generados en la transición de los cerámicos de la configuración D, a diferencia de la configuración C donde esfuerzos out-of-plane de menor magnitud (1.3KPa) son producidos es la transición (GDZ-YSZ), lo anterior resulta de la presencia de poros y grietas horizontales ubicadas en la interfaz de los materiales cerámicos (ver Figura 23).

Figuras 15, 22 y 29 (b) grafican los esfuerzos in-plane a lo largo de la interfaz YSZ-Denso/TGO para las tres configuraciones, en la que se puede identificar una tendencia similar de las configuraciones B y C al momento del calentamiento y enfriamiento, no obstante, es importante observar que a diferencia de la interfaz GDZ/YSZ, en este caso la distribución de esfuerzos a nivel de magnitud es mucho más significativa, en el orden de (~300MPa), lo cual se atribuye a la mayor diferencia de los coeficientes de expansión térmica que existe principalmente entre el cerámico YSZ y la capa intermedia metálica (BC). Resulta importante

identificar la diferente tendencia cualitativa y cuantitativa que se observa en la configuración D, Figura 29 (b) especialmente después del calentamiento, donde esfuerzos de menor magnitud son generados ($\sim 70\text{MPa}$) lo que se atribuye a la presencia de una capa YSZ menos densa (presencia de poros y grietas).

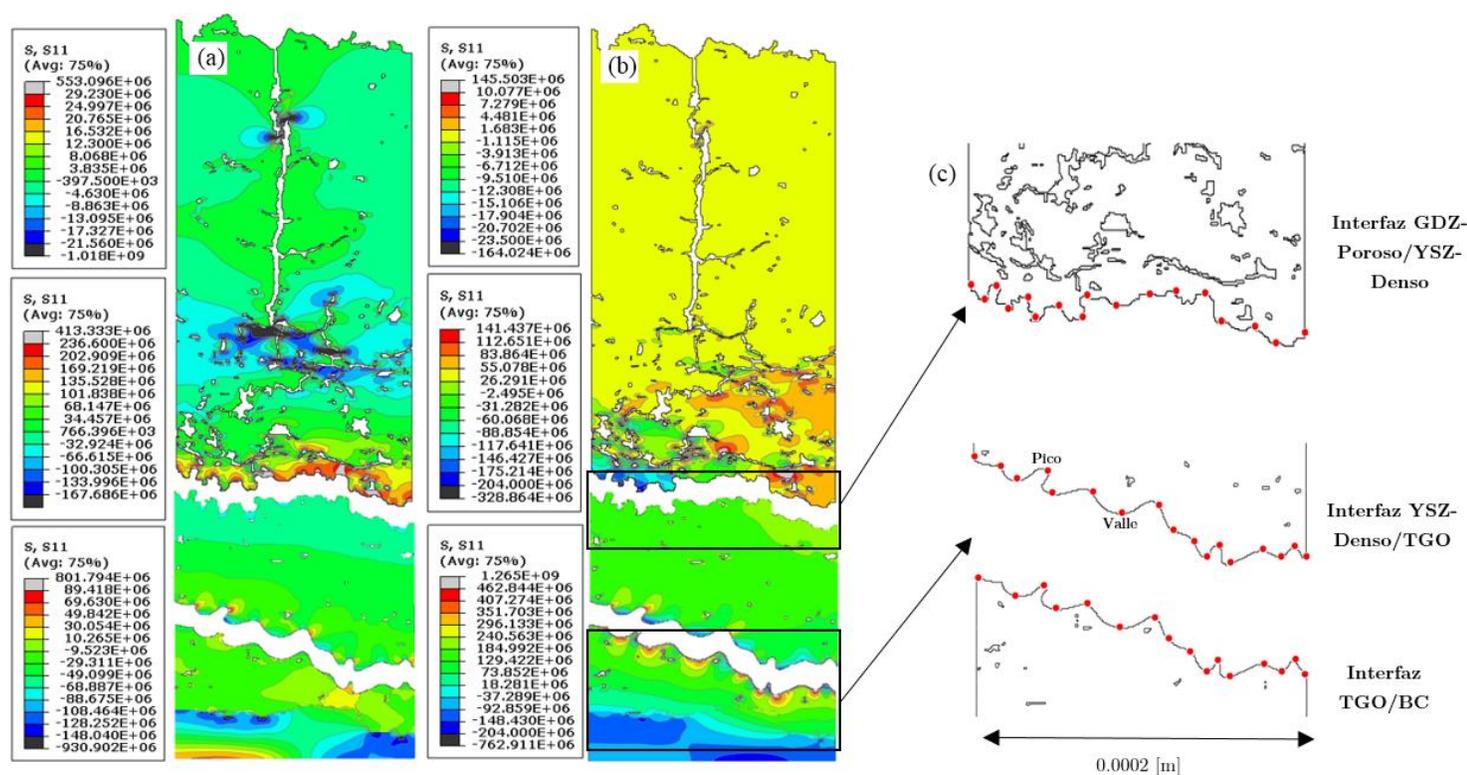


Figura 14. Distribución de esfuerzos in-plane configuración B, Después de calentamiento $1000\text{ }^{\circ}\text{C}$ (a), Enfriamiento $25\text{ }^{\circ}\text{C}$ (b) y Diferentes puntos trazados a lo largo de las interfases (c).

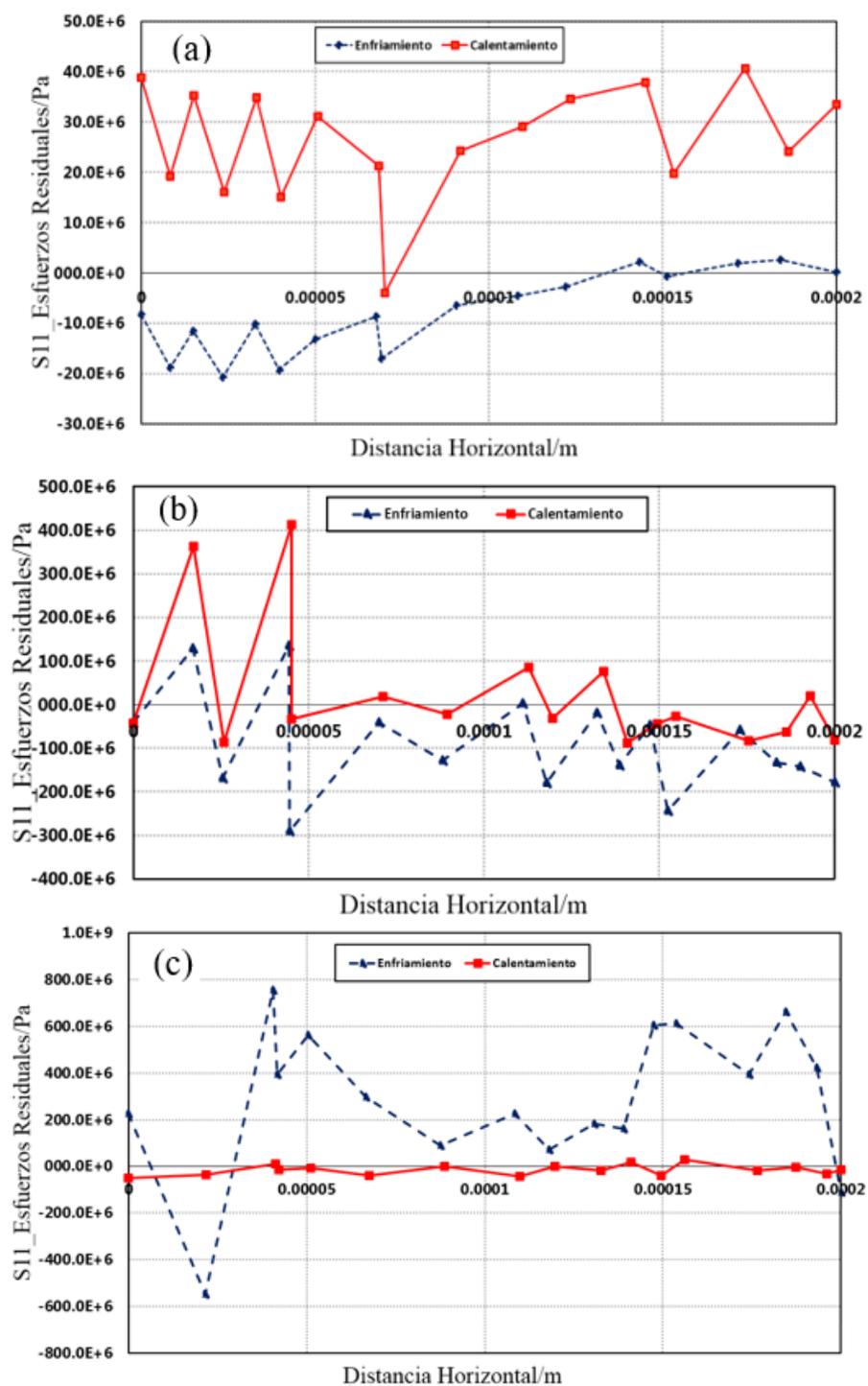


Figura 15. Distribución de esfuerzos in-plane a lo largo de la distancia horizontal configuración B, Interfaz GDZ-Poroso/YSZ-Denso (a), Interfaz YSZ-Denso/TGO (b), Interfaz TGO/BC (c).

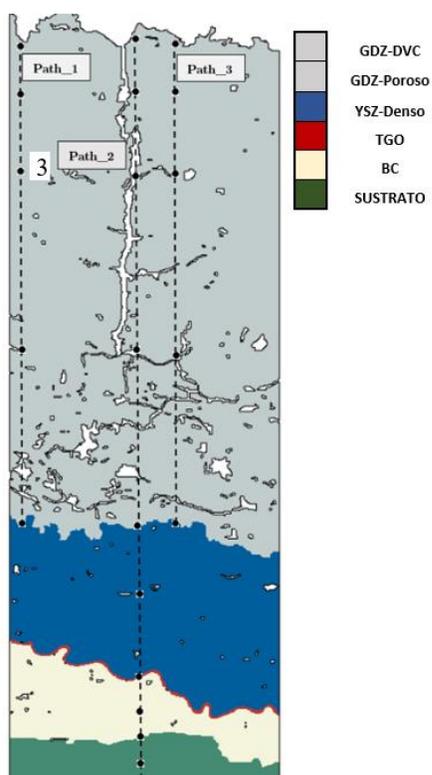


Figura 16. Path_1, Path_2 y Path_3, trazados a lo largo de la distancia vertical MCL_B.

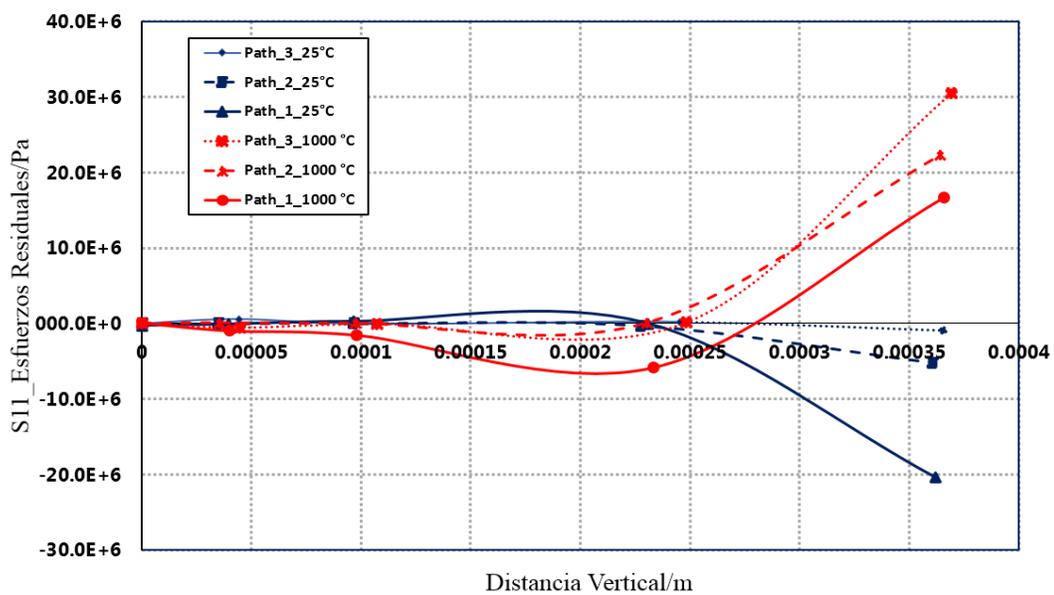


Figura 17. Distribución y comparación de esfuerzos in-plane a lo largo de la distancia vertical configuración B en caminos Path_1, Path_2 y Path_3, después del calentamiento y enfriamiento.

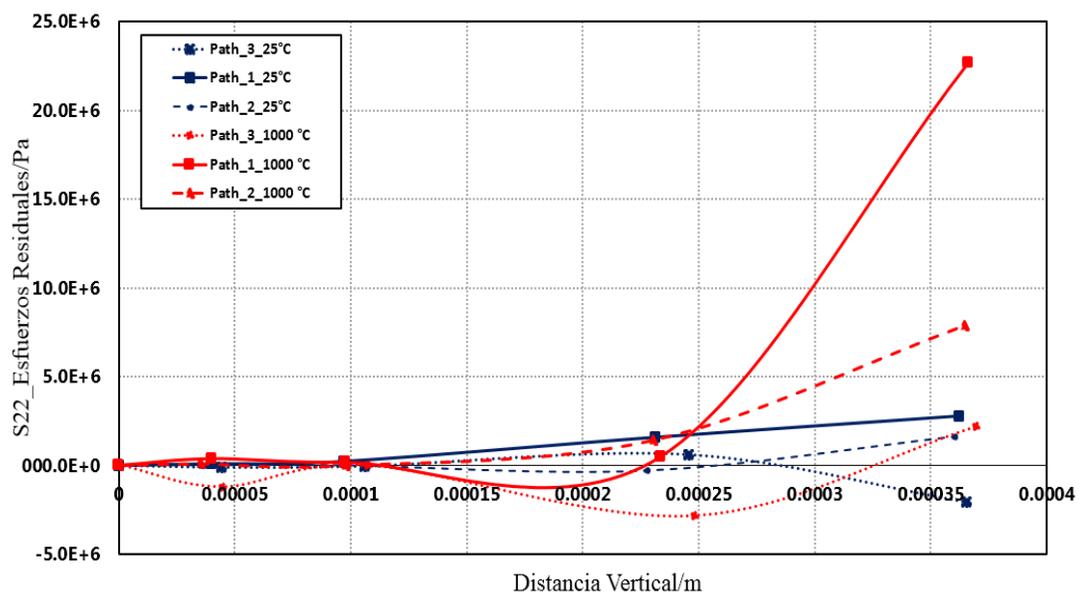


Figura 18. Distribución y comparación de esfuerzos out-of-plane a lo largo de la distancia vertical configuración B en caminos Path_1, Path_2 y Path_3, después del calentamiento y enfriamiento.

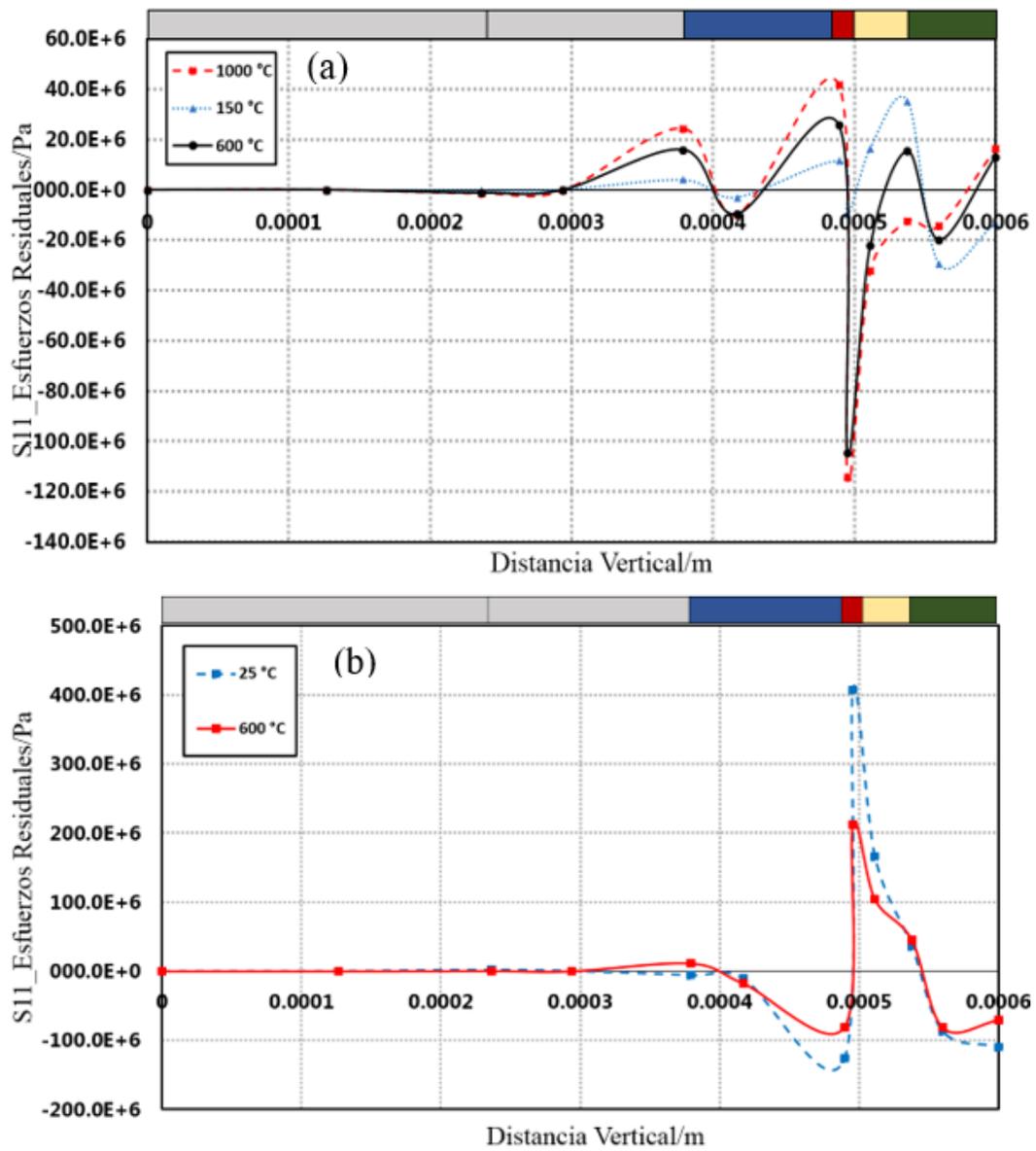


Figura 19. Distribución y comparación de esfuerzos in-plane a lo largo del Path_2, durante calentamiento (a) y durante el enfriamiento (b) a diferentes temperaturas.

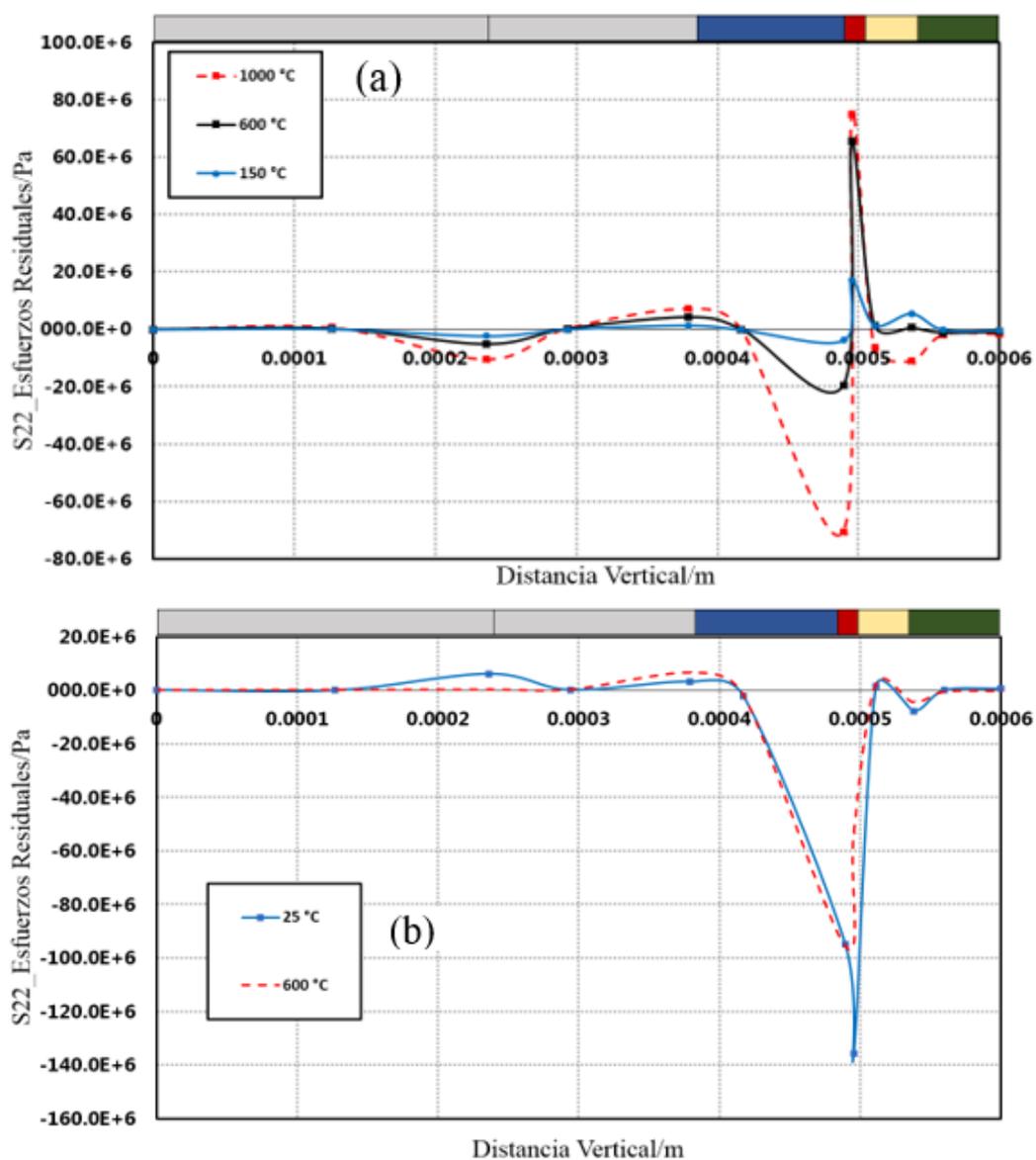


Figura 20. Distribución y comparación de esfuerzos out-of-plane a lo largo del Path_2, durante calentamiento (a) y durante el enfriamiento (b) a diferentes temperaturas.

Por otro lado, dentro de esta interfaz se puede notar la influencia del tipo morfología y la forma de la distribución rugosa. En la Figura 15 y 22 (b) se puede evidenciar que después del calentamiento esfuerzos de tensión son obtenidos en los picos y esfuerzos en compresión en los valles. Después del enfriamiento, la distribución cualitativa de los esfuerzos sigue

siendo la misma pero sus valores disminuyen. Los esfuerzos de tensión máxima en los picos aumentan cuando la amplitud de la rugosidad se incrementa, en el orden 400MPa.

Para la interfaz TGO/BC, la Figura 15, 22 y 29 (c), la distribución de los esfuerzos dentro de la capa intermedia (BC) es analizada. Después del calentamiento esfuerzos de tensión son generados en los picos y esfuerzos en compresión en los valles (aprox. ~ 30 MPa). Sin embargo, después del enfriamiento, se obtiene esfuerzos altamente localizados con la misma tendencia, en el orden de ~ 600 MPa en magnitud. Lo anterior es consecuencia de la diferencia significativa que existe entre los coeficientes de expansión térmica de los dos materiales que constituyen la interfaz (Cerámico-Metal). De igual forma se puede evidenciar que los esfuerzos son máximos en los picos cuando la amplitud aumenta.

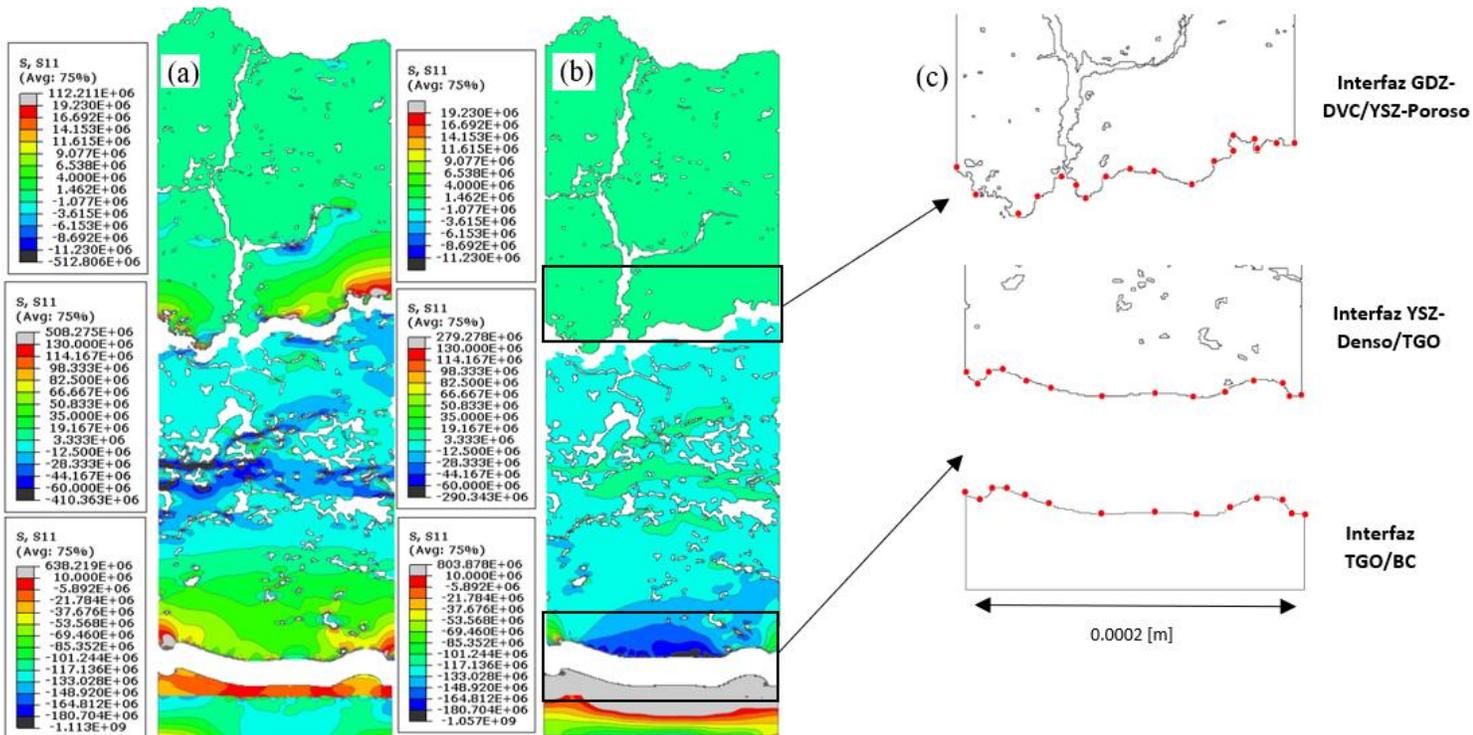


Figura 21. Distribución de esfuerzos in-plane configuración C, Después de calentamiento 1000 ° C (a), Enfriamiento 25 ° C (b) y Diferentes puntos trazados a lo largo de las interfases (c).

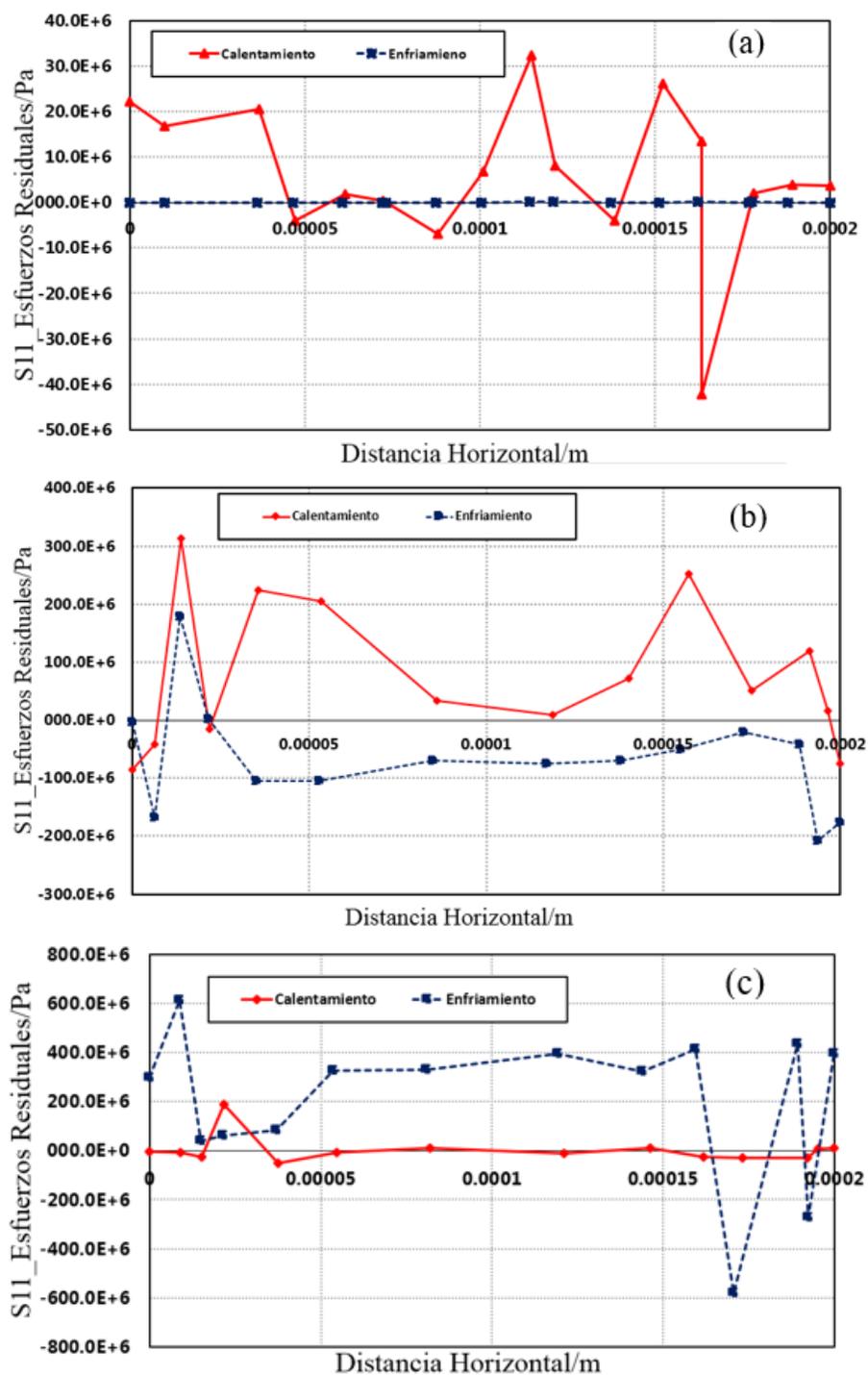


Figura 22. Distribución de esfuerzos in-plane a lo largo de la distancia horizontal configuración C, Interfaz GDZ-DVC/YSZ-Poroso (a), Interfaz YSZ-Denso/TGO (b), Interfaz TGO/BC (c).

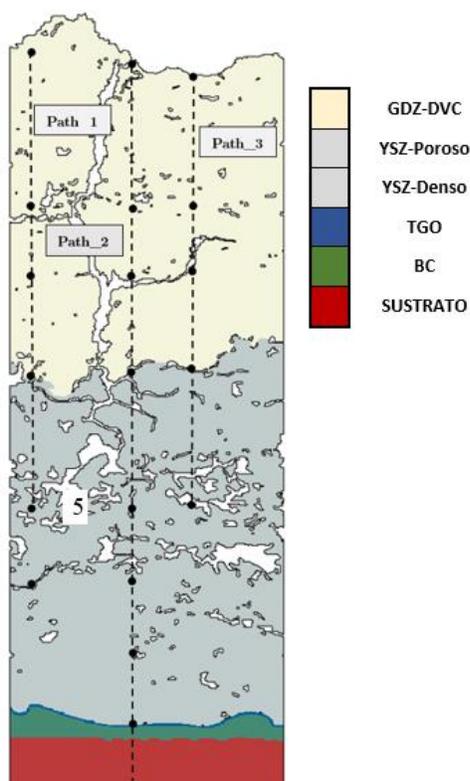


Figura 23. Path_1, Path_2 y Path_3, trazados a lo largo de la distancia vertical MCL_C.

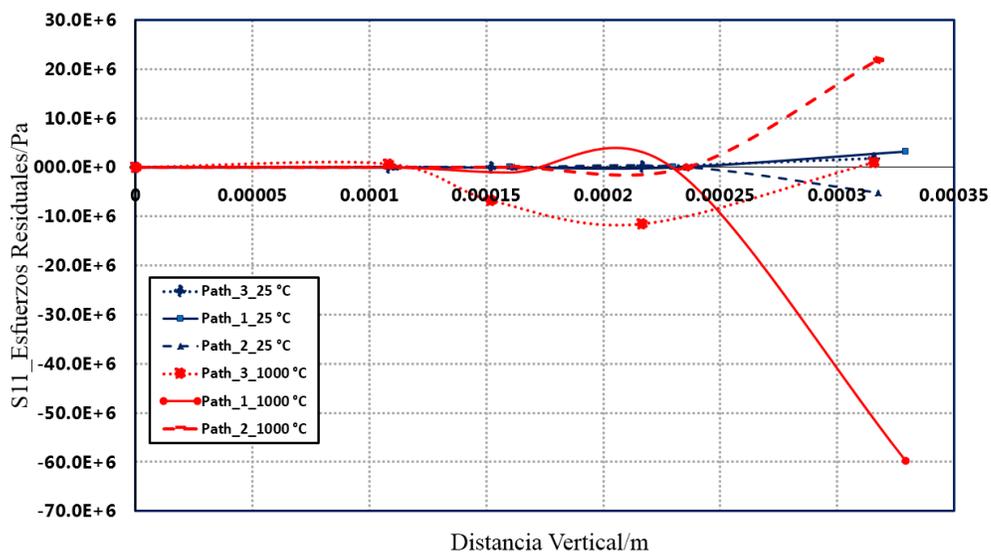


Figura 24. Distribución y comparación de esfuerzos in-plane a lo largo de la distancia vertical configuración C en caminos Path_1, Path_2 y Path_3, después del calentamiento y enfriamiento.

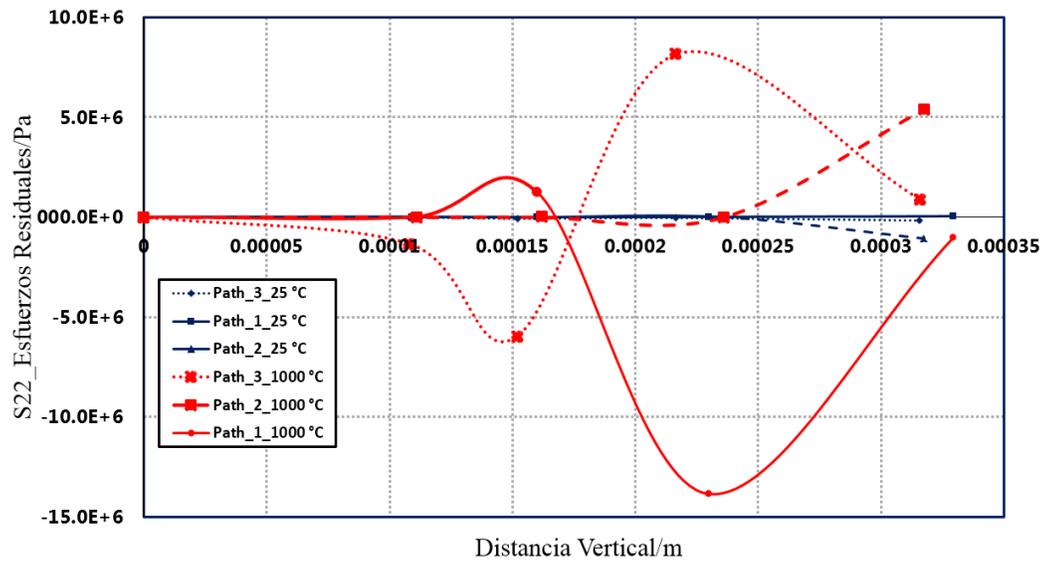


Figura 25. Distribución y comparación de esfuerzos out-of-plane a lo largo de la distancia vertical configuración C en diferentes caminos Path_1, Path_2 y Path_3, después del calentamiento y enfriamiento.

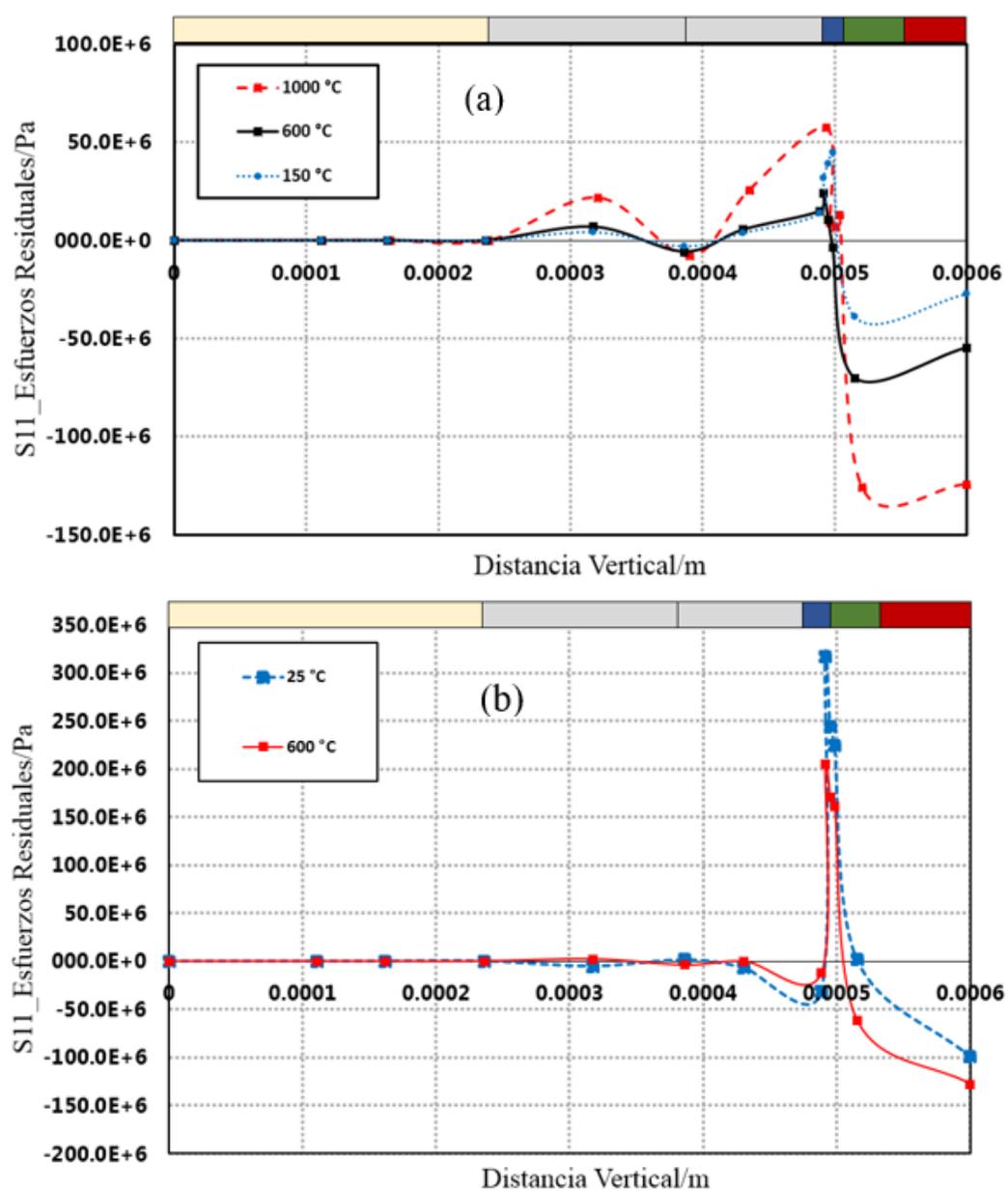


Figura 26. Distribución y comparación de esfuerzos in-plane a lo largo del Path_2, Durante calentamiento (a) y Durante el enfriamiento (b) a diferentes temperaturas.

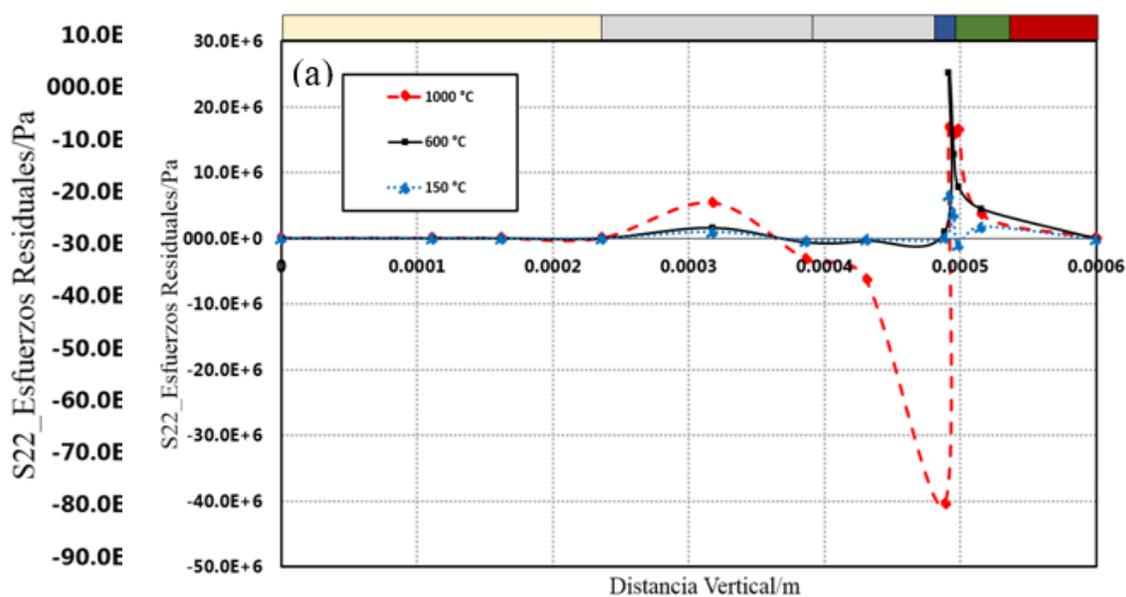


Figura 27. Distribución y comparación de esfuerzos out-of-plane a lo largo del Path_2, Durante calentamiento (a) y Durante el enfriamiento (b) a diferentes temperaturas.

De las Figuras 19, 20, 26, 27, 33 y 34 se puede observar como los esfuerzos normales evolucionan a medida que la temperatura aumenta, asimismo, como los esfuerzos obtienen diferente tendencia a medida que la temperatura disminuye. Es importante evidenciar que los esfuerzos a nivel de magnitud aumentan cuando existe una transición de material. Del mismo modo, resulta interesante evidenciar que, durante el enfriamiento en las secciones cerámicas de las tres configuraciones, los esfuerzos tienden a disminuir en magnitud, sin embargo, los esfuerzos aumentan cuando existe una transición cerámico-metal. Es importante destacar la diferencia que existe cuando se traza diferentes caminos (Paths) a lo largo del recubrimiento B Figura 16. Si se analiza puntos (nodos) específicos que se encuentran a la misma altura, pero de diferentes caminos, diferencias importantes se pueden evidenciar. Por ejemplo, si analizamos el punto tres a lo largo de los tres caminos (Figura 17), se observa la importancia de la presencia de grietas verticales que permitan aliviar los esfuerzos in-plane. A medida que

los nodos se alejan de la grieta vertical más es su nivel en magnitud de esfuerzo. De las Figuras 17 y 18, se puede identificar las tendencias de los diferentes puntos a lo largo de los tres caminos, donde una reducción en la distribución de esfuerzos es obtenida cuando existe la presencia de poros, grietas horizontales y verticales.

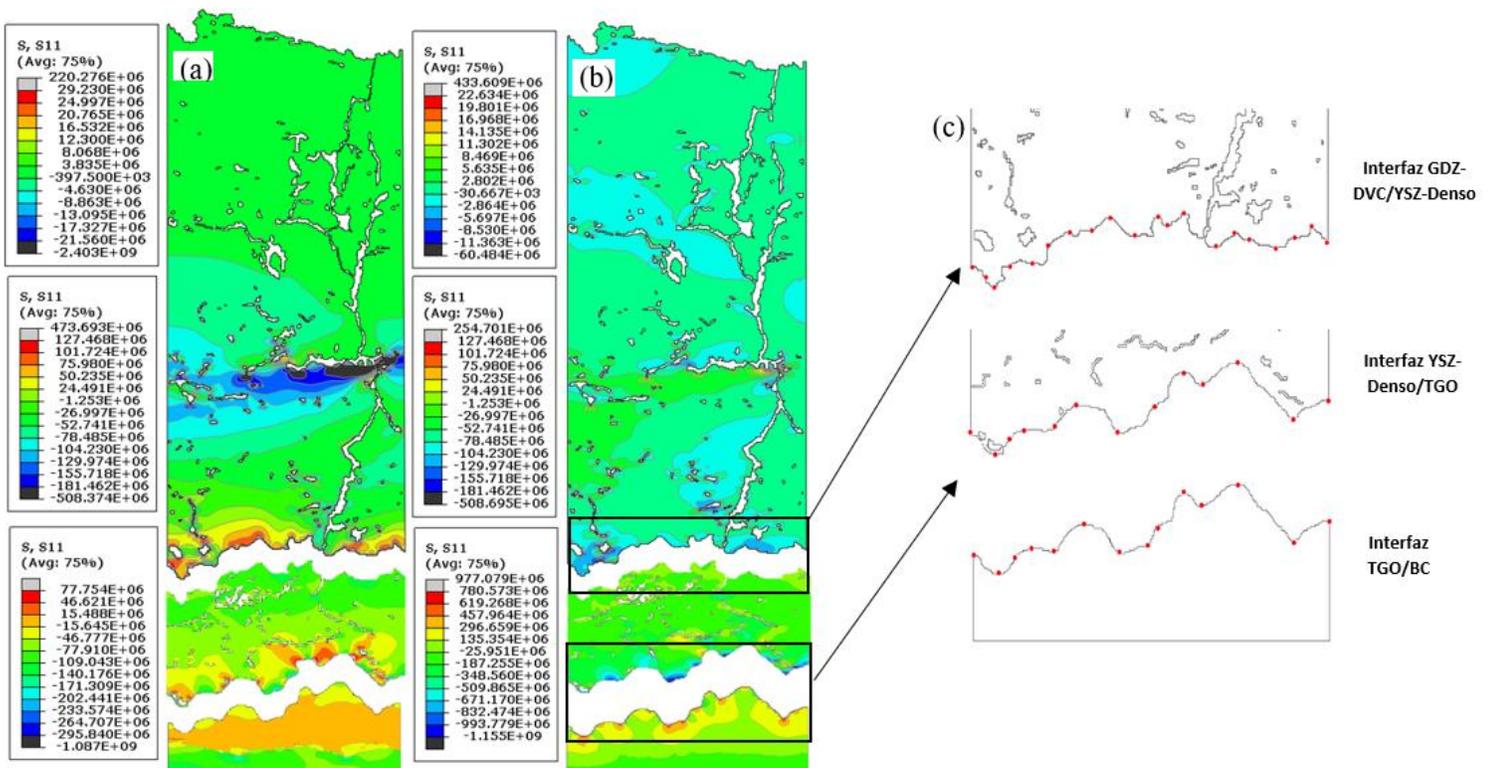


Figura 28. Distribución de esfuerzos in-plane configuración D, Después de calentamiento 1000 ° C (a), Enfriamiento 25 ° C (b) y Diferentes puntos trazados a lo largo de las interfases (c).

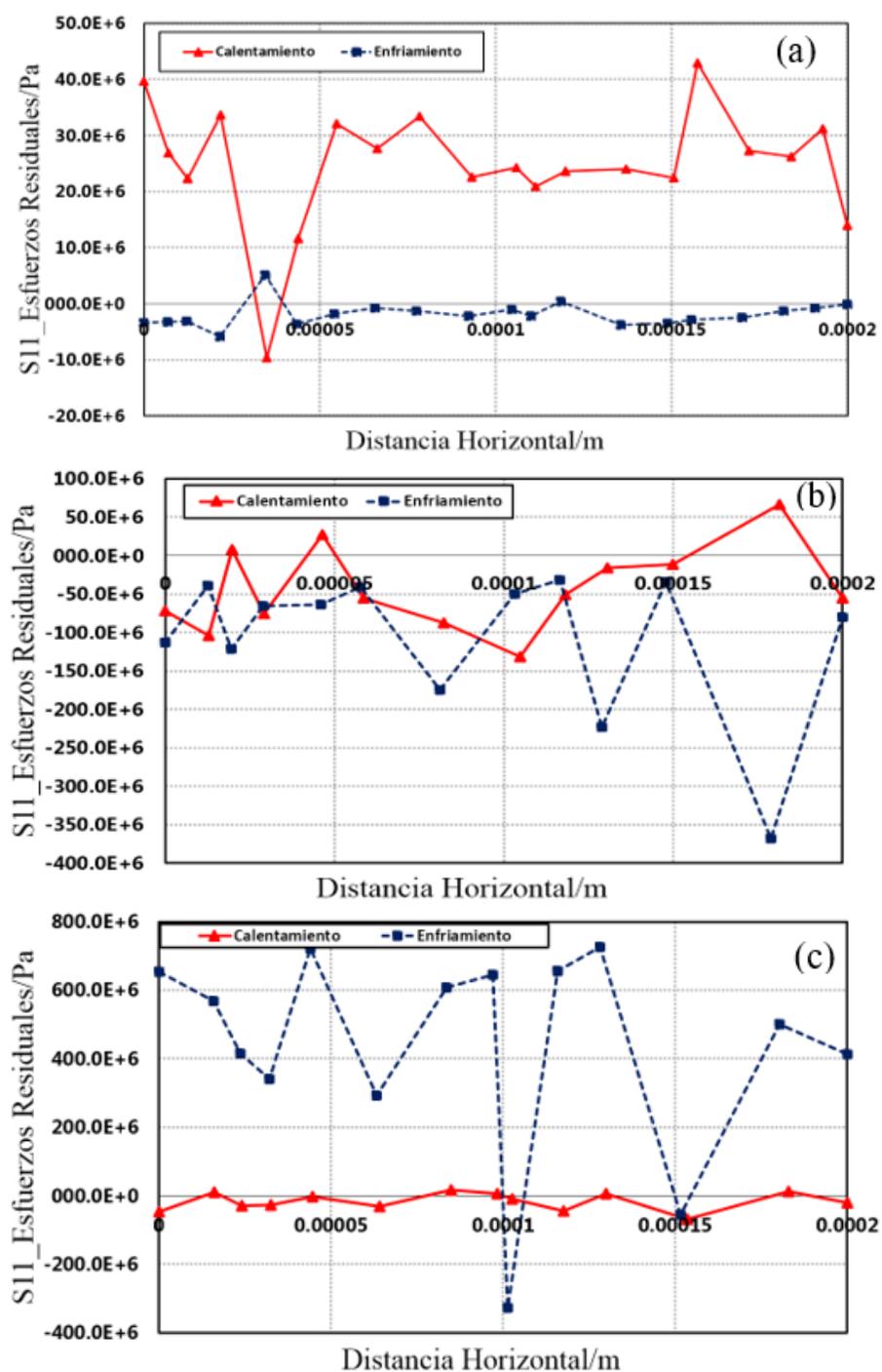


Figura 29. Distribución de esfuerzos in-plane a lo largo de la distancia horizontal configuración D, Interfaz GDZ-DVC/YSZ-Denso (a), Interfaz YSZ-Denso/TGO (b), Interfaz TGO/BC (c).

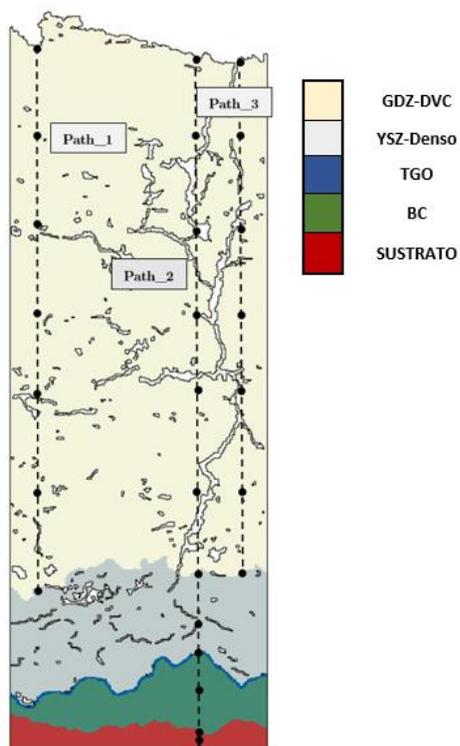


Figura 30. Path_1, Path_2 y Path_3, trazados a lo largo de la distancia vertical MCL_D.

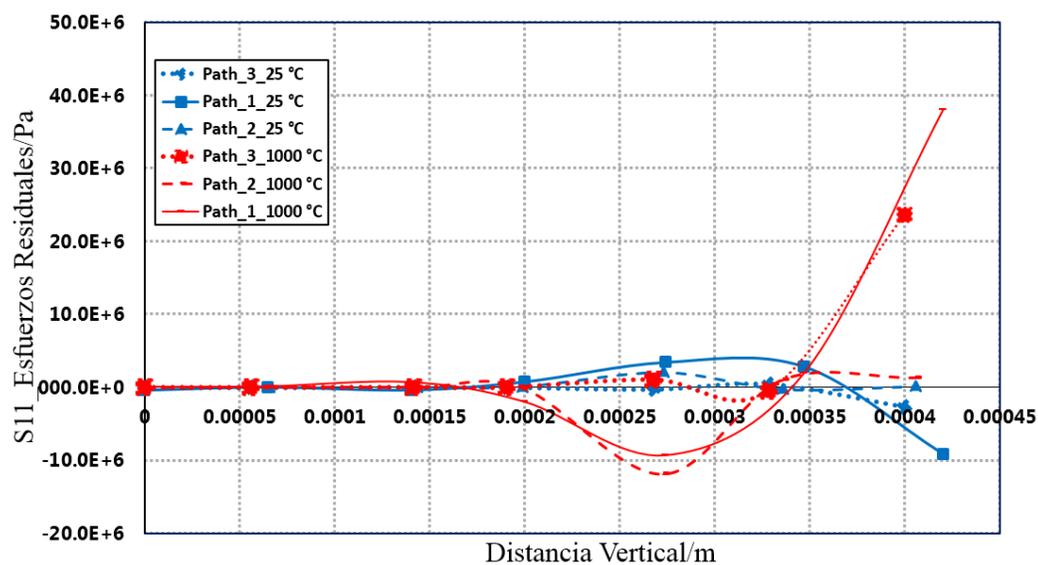


Figura 31. Distribución y comparación de esfuerzos in-plane a lo largo de la distancia vertical configuración D en caminos Path_1, Path_2 y Path_3, después del calentamiento y enfriamiento.

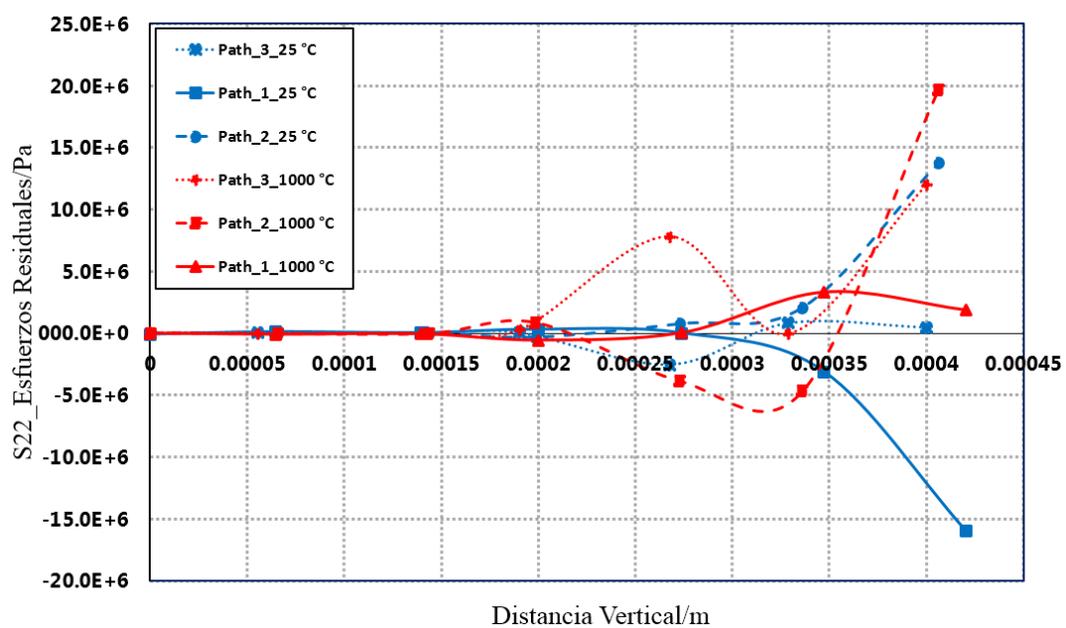


Figura 32. Distribución y comparación de esfuerzos out-of-plane a lo largo de la distancia vertical configuración D en diferentes caminos Path_1, Path_2 y Path_3, después del calentamiento y enfriamiento.

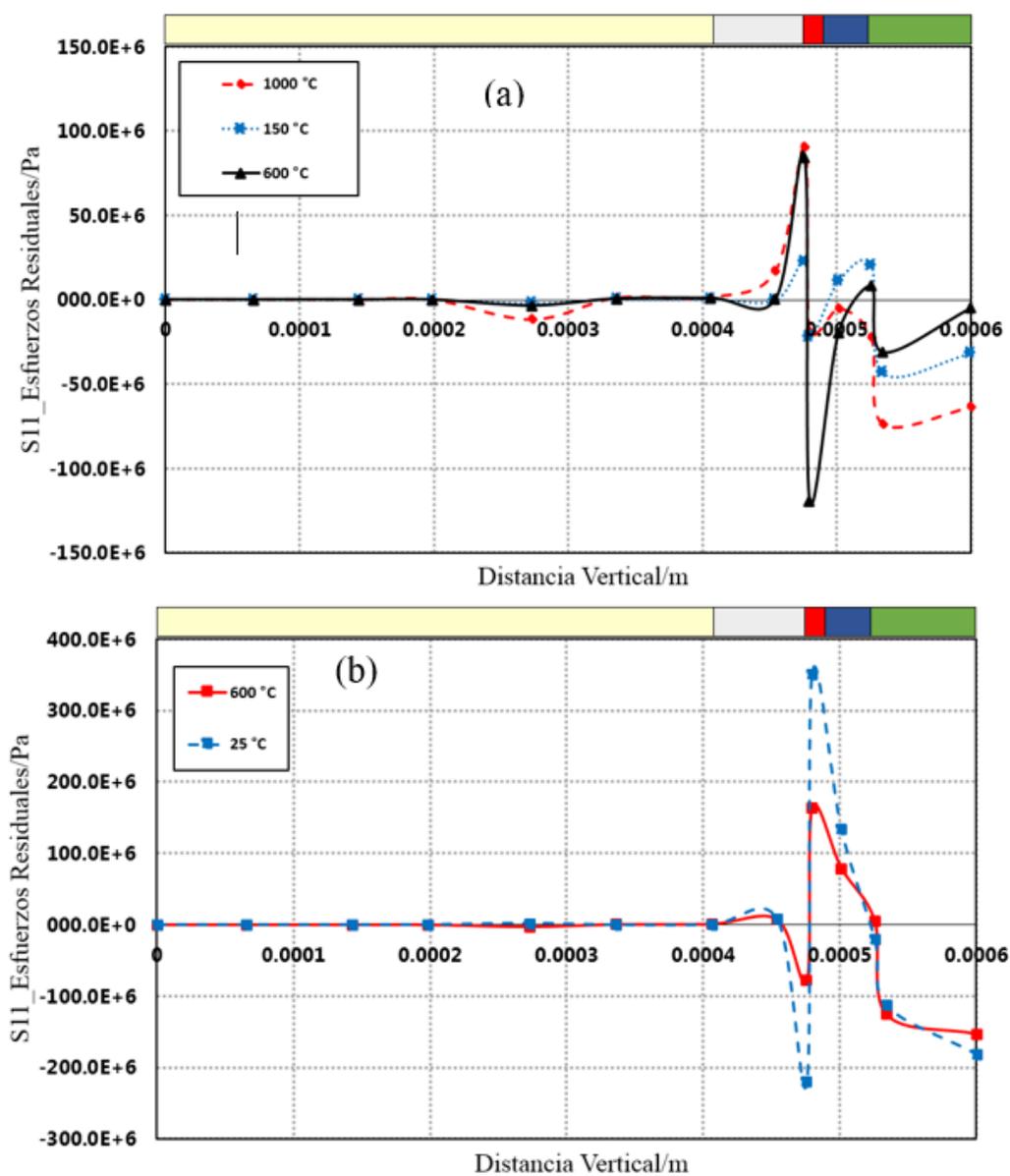


Figura 33. Distribución y comparación de esfuerzos in-plane a lo largo del Path_2, durante calentamiento (a) y durante el enfriamiento (b) a diferentes temperaturas.

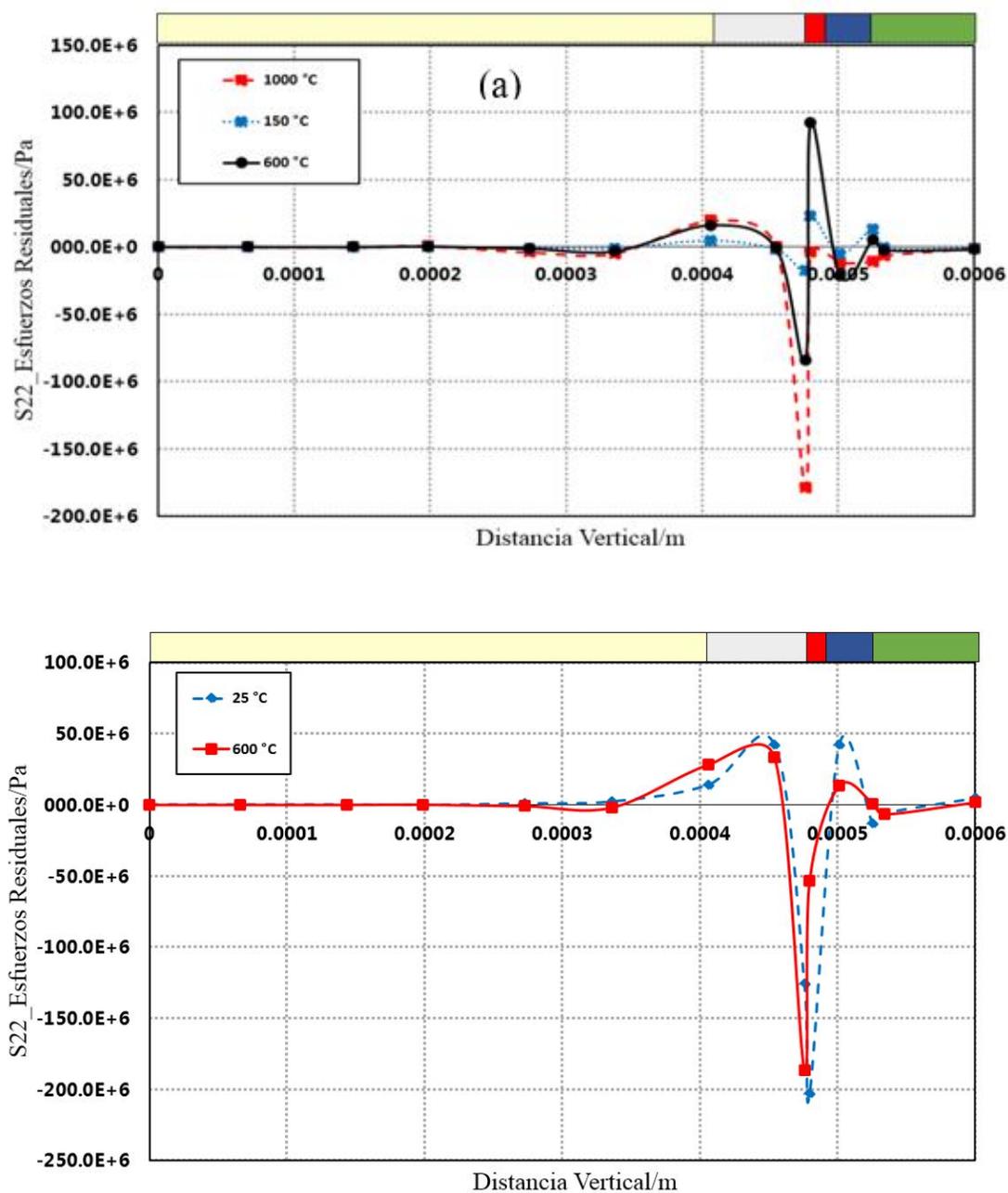


Figura 34. Distribución y comparación de esfuerzos out-of-plane a lo largo del Path_2, durante calentamiento (a) y durante el enfriamiento (b) a diferentes temperaturas.

De la Figura 24 y 25, se puede identificar como los esfuerzos normales se distribuyen a lo largo del recubrimiento C a lo largo de diferentes caminos. La diferencia más importante se encuentra cuando se compara el punto (nodo) 5 en los tres caminos. Los esfuerzos in-plane aumentan cuando existe la presencia de poros y grietas horizontales, no obstante, lo contrario ocurre en la distribución de los esfuerzos out-of-plane, en el cual se evidencia una reducción de la magnitud de los esfuerzos.

Con las observaciones anteriores, una correlación de la distribución en los esfuerzos a la durabilidad de las configuraciones de múltiples capas es identificada. Principalmente si se analizan las distribuciones de esfuerzos dentro de las interfases y a lo largo del recubrimiento. En la cual una configuración GDZ-DVC/YSZ-Poroso en la interfaz de los materiales cerámicos es necesaria para poder reducir la magnitud de los esfuerzos normales. Si bien una capa YSZ-Denso garantiza mayor tenacidad que la capa YSZ-Poroso, la presencia de la capa TGO y el crecimiento de esta induce esfuerzos de magnitud significativa, la sustitución por una capa YSZ-Poroso resultaría en un enfoque práctico para poder reducir los esfuerzos normales.

Si se analizan los resultados experimentales en términos de durabilidad, una tendencia similar es observada si se compara los resultados de distribución de esfuerzos obtenidos numéricamente. La micrografía B que contiene capa porosa de GDZ en general mostro menor durabilidad en el estudio experimental, en donde, los resultados numéricos relacionan este factor a la presencia de configuraciones cerámicas con transiciones GDZ-Poroso/YSZ-Denso. Es importante recalcar que una relación directa entre los resultados experimentales y numéricos no es posible por diferentes factores numéricos que se alejan de los experimentos

realizados. No obstante, es posible evidenciar los posibles lugares más propensos a falla durante el ciclo de operación real de una turbina de gas. Los resultados numéricos no se alejan en el modo estándar de delimitación cerca de la interfaz TGO/Capa Superior, esto se puede evidenciar en la alta concentración de esfuerzos que existe en esta interfaz, si se compara con la distribución de esfuerzos entre las interfaces cerámicas que es significativamente menor. Sin embargo, este estudio entrega un aporte en términos de posibles variantes cerámicas dentro de las configuraciones multicapa. Los resultados indican que la capa porosa de GDZ dentro del recubrimiento es propenso a la delimitación cohesiva debido a la concentración de esfuerzos residuales normales, igualmente, como se indica el estudio experimental el uso de una capa GDZ porosa no es viable debido a su menor resistencia a la fractura en comparación con el equivalente del cerámico YSZ. Por esta razón, este estudio propone la inserción de una capa GDZ densa con el fin de mejorar la durabilidad del recubrimiento. Al igual que los resultados experimentales la configuración DVC tiene limitaciones potenciales debido a la falta de funcionalidad en términos de alivio de esfuerzos out-of-plane.

CONCLUSIONES

El análisis de elementos finitos juega un papel vital para poder optimizar los diseños de recubrimientos de barrera térmica. El trabajo de investigación comprueba la fiabilidad de las mallas generadas en OOF2, a través de la creación de modelos numéricos en ABAQUS. Así mismo, se logra el acoplamiento exitoso de estos paquetes de elementos finitos.

La investigación presenta la simulación de dos modelos numéricos, el primero para poder comprender la funcionalidad de los recubrimientos, mediante la creación de un modelo capaz de predecir conductividad térmica efectiva. Los resultados de la simulación comprueban los beneficios encontrados en resultados experimentales, en la reducción de la conductividad térmica a través de la sustitución por capas porosas de baja conductividad, ya sea de GDZ (recubrimiento B) o YSZ (recubrimiento C) en lugar de arquitecturas DVC. Del mismo modo, se comprobó que la arquitectura de recubrimiento con variante DVC de GDZ (recubrimiento D) presentó conductividad térmica más alta, lo que se atribuye a la alta densidad del recubrimiento. Para este modelo, el acoplamiento OOF2 -ABAQUS comprobó ser una herramienta muy versátil para la predicción de la conductiva térmica efectiva.

Para el segundo modelo, este trabajo presentó la creación de un modelo termomecánico, para el estudio del desarrollo de los esfuerzos normales asociados a la presencia de morfologías reales de microestructuras de TBCs multicapa y multimaterial, basados en la combinación YSZ-GDZ. Los roles de la morfología de las interfaces rugosas, y presencia de variantes microestructurales fueron evaluadas. Los resultados indican que la variante microestructural C presenta características que pueden garantizar su correcto funcionamiento

durante ciclos de operación. Esto se debe principalmente, al uso de configuración GDZ-DVC/YSZ-Poroso en la transición de materiales cerámicos. Con lo último se logró una correlación a la durabilidad de las configuraciones de múltiples capas.

Por último, para los dos modelos se logró el acoplamiento OOF2 -ABAQUS, donde se comprobó ser una herramienta muy versátil para la predicción de la conductiva térmica efectiva y para determinar la distribución de los esfuerzos en los sistemas de recubrimientos de barrera térmica.

REFERENCIAS

- Aktaa, J., Sfar, K., & Munz, D. (2005). Assessment of TBC systems failure mechanisms using a fracture mechanics approach. *Acta Materialia*, 53(16), 4399–4413. <https://doi.org/10.1016/j.actamat.2005.06.003>
- Bakan, E. (n.d.). *Yttria-Stabilized Zirconia / Gadolinium Zirconate Double-Layer Plasma-Sprayed Thermal Barrier Coating Systems (TBCs)* (Vol. 294).
- Bakan, E., Mack, D. E., Mauer, G., & Vaßen, R. (2014). Gadolinium zirconate/YSZ thermal barrier coatings: Plasma spraying, microstructure, and thermal cycling behavior. *Journal of the American Ceramic Society*, 97(12), 4045–4051. <https://doi.org/10.1111/jace.13204>
- Bäker, M., & Seiler, P. (2017). A Guide to Finite Element Simulations of Thermal Barrier Coatings. *Journal of Thermal Spray Technology*, 26(6), 1146–1160. <https://doi.org/10.1007/s11666-017-0592-z>
- Białas, M. (2008). Finite element analysis of stress distribution in thermal barrier coatings. *Surface and Coatings Technology*, 202(24), 6002–6010. <https://doi.org/10.1016/j.surfcoat.2008.06.178>
- Choi, S. R., Zhu, D., & Miller, R. A. (n.d.). Mode I , Mode II , and Mixed-Mode Fracture of Thermal Barrier Coatings At Ambient and Elevated Temperatures.
- Clarke, D. R., Oechsner, M., & Padture, N. P. (2012). Thermal-barrier coatings for more efficient gas-turbine engines. *MRS Bulletin*, 37(10), 891–898. <https://doi.org/10.1557/mrs.2012.232>
- Dassault Systèmes Simulia. (2012). Analysis User’s Manual Volume 2: Analysis. *Abaqus 6.12, II*.
- Ganvir, A., Kumara, C., Gupta, M., & Nysten, P. (2017). Thermal Conductivity in Suspension Sprayed Thermal Barrier Coatings: Modeling and Experiments. *Journal of Thermal Spray Technology*, 26(1–2), 71–82. <https://doi.org/10.1007/s11666-016-0503-8>
- Golosnoy, I. O., Cipitria, A., & Clyne, T. W. (2009). Heat transfer through plasma-sprayed thermal barrier coatings in gas turbines: A review of recent work. *Journal of Thermal Spray Technology*, 18(5–6), 809–821. <https://doi.org/10.1007/s11666-009-9337-y>
- Hille, T. S. (n.d.). *Lifetime Modeling of Thermal Barrier Coatings*.
- Kulkarni, A., Wang, Z., Nakamura, T., Sampath, S., Golland, A., Herman, H., ... Steinbrech, R. W. (2003). Comprehensive microstructural characterization and predictive property modeling of plasma-sprayed zirconia coatings. *Acta Materialia*, 51(9), 2457–2475. [https://doi.org/10.1016/S1359-6454\(03\)00030-2](https://doi.org/10.1016/S1359-6454(03)00030-2)

- Langer, S. A., Fuller, E. R., & Carter, W. C. (2001). Oof: An image-based finite-element analysis of material microstructures. *Computing in Science and Engineering*, 3(3), 15–23. <https://doi.org/10.1109/5992.919261>
- Li, B., Fan, X., Zhou, K., & Wang, T. J. (2017). Effect of oxide growth on the stress development in double-ceramic-layer thermal barrier coatings. *Ceramics International*, 43(17), 14763–14774. <https://doi.org/10.1016/j.ceramint.2017.07.218>
- Mazilin, I. (2017). Lanthanum and gadolinium zirconate thermal barrier coatings structure and properties evolution, (May 2014).
- Michlik, P., & Berndt, C. (2006). Image-based extended finite element modeling of thermal barrier coatings. *Surface and Coatings Technology*, 201(6), 2369–2380. <https://doi.org/10.1016/j.surfcoat.2006.04.003>
- Qiao, J. H., Bolot, R., Liao, H. L., & Coddet, C. (2013). Knudsen effect on the estimation of the effective thermal conductivity of thermal barrier coatings. *Journal of Thermal Spray Technology*, 22(2–3), 175–182. <https://doi.org/10.1007/s11666-012-9878-3>
- Ranjbar-Far, M., Absi, J., Mariaux, G., & Dubois, F. (2010). Simulation of the effect of material properties and interface roughness on the stress distribution in thermal barrier coatings using finite element method. *Materials and Design*, 31(2), 772–781. <https://doi.org/10.1016/j.matdes.2009.08.005>
- Ranjbar-Far, M., Absi, J., Mariaux, G., & Shahidi, S. (2010). Effect of residual stresses and prediction of possible failure mechanisms on thermal barrier coating system by finite element method. *Journal of Thermal Spray Technology*, 19(5), 1054–1061. <https://doi.org/10.1007/s11666-010-9512-1>
- Ranjbar-far, M., Absi, J., Mariaux, G., & Smith, D. S. (2011). Crack propagation modeling on the interfaces of thermal barrier coating system with different thickness of the oxide layer and different interface morphologies. *Materials and Design*, 32(10), 4961–4969. <https://doi.org/10.1016/j.matdes.2011.05.039>
- Song, J., Li, S., Yang, X., Qi, H., & Shi, D. (2018). Numerical investigation on the cracking behaviors of thermal barrier coating system under different thermal cycle loading waveforms. *Surface and Coatings Technology*, 349(May), 166–176. <https://doi.org/10.1016/j.surfcoat.2018.05.049>
- Tan, Y., Longtin, J. P., & Sampath, S. (2006). Modeling thermal conductivity of thermal spray coatings: Comparing predictions to experiments. *Proceedings of the International Thermal Spray Conference*, 15(December), 545–552. <https://doi.org/10.1361/105996306X147216>
- Torkashvand, K., Poursaeidi, E., & Ghazanfarian, J. (2018). Experimental and numerical study of thermal conductivity of plasma-sprayed thermal barrier coatings with random distributions of pores. *Applied Thermal Engineering*, 137(April), 494–503.

<https://doi.org/10.1016/j.applthermaleng.2018.04.002>

- Viswanathan, V., Dwivedi, G., & Sampath, S. (2015). Multilayer, multimaterial thermal barrier coating systems: Design, synthesis, and performance assessment. *Journal of the American Ceramic Society*, 98(6), 1769–1777. <https://doi.org/10.1111/jace.13563>
- Wang, L., Li, D. C., Yang, J. S., Shao, F., Zhong, X. H., Zhao, H. Y., ... Wang, Y. (2016). Modeling of thermal properties and failure of thermal barrier coatings with the use of finite element methods: A review. *Journal of the European Ceramic Society*, 36(6), 1313–1331. <https://doi.org/10.1016/j.jeurceramsoc.2015.12.038>
- Widjaja, S., Limarga, A. M., & Yip, T. H. (2003a). Erratum: Oxidation behavior of a plasma-sprayed functionally graded ZrO₂/Al₂O₃ thermal barrier coating (Materials Letters (2002) 57 (628-634) PII: S0167577X0200842X). *Materials Letters*, 57(9–10), 1649. [https://doi.org/10.1016/S0167-577X\(03\)00024-7](https://doi.org/10.1016/S0167-577X(03)00024-7)
- Widjaja, S., Limarga, A. M., & Yip, T. H. (2003b). Modeling of residual stresses in a plasma-sprayed zirconia y alumina functionally graded-thermal barrier coating, 434(03), 216–227. [https://doi.org/10.1016/S0040-6090\(03\)00427-9](https://doi.org/10.1016/S0040-6090(03)00427-9)

ANEXO A: CODIGO PYTHON – ABAQUS

Los siguientes códigos contienen instrucciones escritas en Python Scripting, lenguaje para definir varios modelos desarrollados en ABAQUS FEA. Estos modelos deben ejecutarse en ABAQUS CAE, empleando la opción Ejecutar script (Run Script). Por razones prácticas el detalle del código no está incluido en el escrito del trabajo de titulación, sólo el nombre del script es especificado para los modelos y debe ser referenciado a la Versión digital de este proyecto.

Modelo Termo- mecánico Recubrimiento-B:

Script: Modelo_Termomec_B.py

Modelo Termo- mecánico Recubrimiento-C:

Script: Modelo_Termomec_C.py

Modelo Termo- mecánico Recubrimiento-D:

Script: Modelo_Termomec_D.py