



UNIVERSIDAD NACIONAL AUTONOMA
DE MEXICO

FACULTAD DE QUIMICA

APLICACION DE UN MODELO DE TRANSFERENCIA
DE MASA AL PROCESO DE CARBURIZACION

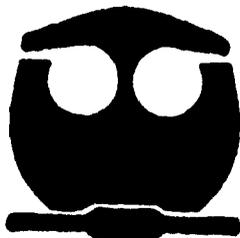
T E S I S

QUE PARA OBTENER EL TITULO DE:

INGENIERO QUIMICO METALURGICO

P R E S E N T A

BLANCA ESTELA TORRES CAMPOS



MEXICO, D. F.

1995

FALLA DE ORIGEN

TESIS CON
FALLA DE ORIGEN



Universidad Nacional
Autónoma de México



UNAM – Dirección General de Bibliotecas
Tesis Digitales
Restricciones de uso

DERECHOS RESERVADOS ©
PROHIBIDA SU REPRODUCCIÓN TOTAL O PARCIAL

Todo el material contenido en esta tesis esta protegido por la Ley Federal del Derecho de Autor (LFDA) de los Estados Unidos Mexicanos (México).

El uso de imágenes, fragmentos de videos, y demás material que sea objeto de protección de los derechos de autor, será exclusivamente para fines educativos e informativos y deberá citar la fuente donde la obtuvo mencionando el autor o autores. Cualquier uso distinto como el lucro, reproducción, edición o modificación, será perseguido y sancionado por el respectivo titular de los Derechos de Autor.

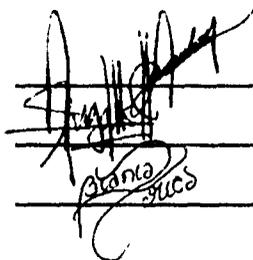
Jurado asignado según el tema :

Presidente Prof. Roberto Galicia García
Vocal Prof. José Antonio Barrera Godínez
Secretario Prof. Carlos González Rivera
1er. Suplente Prof. Arturo Ortega Rodríguez
2do. Suplente Prof. Sergio García Galán

Sitio donde se desarrolló el tema:

**Laboratorio de cómputo del Departamento de Ingeniería Química
Metalúrgica.**

Asesor del tema Dr. José Antonio Barrera Godínez
Supervisor técnico M. en C. Alberto Ingalls Cruz
Sustentante Blanca Estela Torres Campos



Handwritten signatures and stamps of the individuals listed in the previous block. The signatures are written over horizontal lines. The signature for Blanca Estela Torres Campos is clearly legible and includes the name and the acronym 'SUCS'.

Contenido

Contenido	i
Lista de Tablas	iv
Lista de Figuras	v
1 Introducción	1
1.1 El propósito de este trabajo	3
2 Revisión de la literatura	4
2.1 Difusión	4
2.1.1 Leyes de Fick	4
2.1.2 Carburización de aceros	5
2.2 Modelado matemático	7
2.2.1 Métodos numéricos	8
2.2.2 Método Explícito (DFE)	10
2.2.3 Métodos Implícitos (DFI y CN)	11
2.2.4 Discretización	12
2.2.5 Norma Euclidiana	13
3 Desarrollo del modelo	14
3.1 Descripción de la carburización	14
3.1.1 Difusión de carbono en aceros	14
3.2 Formulación matemática de la difusión	15
3.2.1 Suposiciones	16

3.2.2	Formulación matemática para un tratamiento donde el coeficiente de difusión es una constante	18
3.2.3	Formulación matemática para un tratamiento donde el coeficiente de difusión es una función de la composición y el tiempo	18
3.3	Solución del modelo	19
3.3.1	Técnicas numéricas	19
3.3.2	Discretización del sistema	19
3.3.2.1	Diferencias finitas explícito	21
3.3.2.2	Diferencias finitas implícito	22
3.3.2.3	Crank Nicholson	22
3.3.3	Solución de los sistemas de ecuaciones algebraicas generados por DFI y CN	23
3.3.4	Programas de cómputo	25
3.4	Validación de las técnicas numéricas	27
3.4.1	Evaluación del intervalo de tiempo y el espaciamiento internodal	27
3.4.1.1	Intervalo de tiempo	27
3.4.1.2	Espaciamiento internodal	28
3.4.2	Comparación entre los métodos	29
3.5	Validación del modelo	29
3.5.1	Tramientos modelados	29
4	Resultados y Análisis de resultados	34
4.1	Validación de las técnicas numéricas	34
4.1.1	Intervalo de tiempo y espaciamiento internodal	34
4.1.2	Comparación entre métodos	37
4.2	Validación del modelo	38
4.3	Análisis general de resultados	42
5	Conclusiones	44

	iii
Bibliografía	45
6 Apéndices	47
A Ecuaciones de diferencias finitas para nodos centrales	48
B Listados de los programas	50
C Ecuaciones para temperatura y concentración superficial	118

Lista de Tablas

4.1	Comparación de los perfiles de concentración calculadas con DFE a diferente espaciamento internodal con la solución analítica	36
4.2	Comparación de las normas euclidianas de las diferencias de concentración respecto a la solución analítica obtenidas a distintos espaciamentos internodales . .	37
4.3	Comparación de las normas euclidianas de las diferencias de concentración respecto a la solución analítica	38
4.4	Comparación de las normas euclidianas de las diferencias de concentración respecto a los valores experimentales para los tres tratamientos	43

Lista de Figuras

3.1	Esquema de la discretización del sistema	20
3.2	Balance para un nodo interno	21
3.3	Matriz Tridiagonal	23
3.4	Condiciones de operación durante el Tratamiento I	30
3.5	Condiciones de operación durante el Tratamiento II	31
3.6	Condiciones de operación durante el Tratamiento III	32
4.7	Comparación de la solución analítica con soluciones numéricas para diferentes números de nodos espaciales obtenidas con el método DFE	35
4.8	Comparación entre los perfiles predichos por cada uno de los métodos empleados en la simulación y el perfil experimental para el Tratamiento I	40
4.9	Comparación entre los perfiles predichos por cada uno de los métodos empleados en la simulación y el perfil experimental para el Tratamiento II	41
4.10	Comparación entre los perfiles predichos por cada uno de los métodos empleados en la simulación y el perfil experimental para el Tratamiento III	42

Capítulo 1

Introducción

La carburización es un proceso cuyo propósito es proporcionar dureza superficial a las componentes de acero cuya resistencia al desgaste sea de importancia primaria. El proceso está controlado por el transporte de masa en una fase sólida conocido como mecanismo de difusión. Este mecanismo puede estudiarse bajo dos enfoques: atomístico y fenomenológico. El enfoque atomístico estudia los mecanismos de difusión al nivel de la estructura cristalina del acero, su propósito es encontrar las relaciones entre la difusividad y la microestructura. El enfoque fenomenológico estudia con que rapidez se transporta el soluto dentro del solvente sólido (la transferencia de masa), y cómo se puede expresar esa rapidez en función de parámetros que se puedan medir [12]. Su propósito es determinar los perfiles de concentración. En el presente trabajo se desarrollará un estudio **fenomenológico** de la carburización. La fuerza motriz del transporte de masa es el potencial químico. Sin embargo, en este trabajo se considera que la fuerza motriz que genera el transporte es una diferencia de concentración entre uno y otro punto del sistema.

En la práctica industrial se requiere de la variación de las condiciones de operación durante el tiempo de tratamiento de carburización. La formulación matemática de problemas como éste muestra que, debido a las condiciones a la frontera resultantes es difícil obtener una solución analítica. Además, la determinación experimental de los contenidos de carbono en la superficie de la pieza no es una tarea sencilla, debido a que la capa carburada cuenta sólo con unos cuantos milímetros de espesor. Ante este panorama la mejor alternativa son las técnicas numéricas implementadas a un programa de cómputo.

En resumen se pretende:

- Modelar la transferencia de masa (carbono) para diferentes tratamientos de carburización, obteniendo los perfiles de concentración correspondientes. Se pretende también, que los programas sean capaces de simular tanto una difusividad constante como una dependiente de la temperatura y la composición.
- Estudiar la influencia que sobre los resultados puedan tener parámetros como el espaciamiento internodal y el intervalo de tiempo. El espaciamiento internodal es un parámetro altamente significativo, que si no se elige correctamente puede conducir al crecimiento acelerado del error. En el caso del intervalo de tiempo, este se restringe en el método explícito para asegurar la estabilidad durante el cálculo.

Para contrastar los métodos numéricos utilizados, se hará uso de la norma euclidiana de las diferencias entre las concentraciones predichas por los modelos y las experimentales.

Las técnicas numéricas a usar son tres esquemas de diferencias finitas: Explícito, Implícito y Crank Nicholson. Se utilizará la solución analítica de un caso sencillo para validar las técnicas de solución y los datos experimentales reportados en la literatura para validar el modelo que simula los casos complejos.

Finalmente y en base a los resultados que se obtengan se analizará:

- La capacidad de las diferencias finitas para modelar el transporte de masa en aceros.
- Las posibilidades que existen de modelar cualquier condición de operación.
- Si el modelado matemático es una metodología suficientemente buena para predecir el comportamiento de un proceso real rápidamente y a bajo costo.

1.1 El propósito de este trabajo

Dada la importancia del mecanismo de difusión de carbono en el proceso de carburización, es necesario dedicar esfuerzos a comprender la difusión y a controlar industrialmente este proceso para asegurar la calidad de las piezas carburadas. Una alternativa para este problema es la simulación del proceso usando las herramientas de la actualidad: los modelos matemáticos, los métodos numéricos y las computadoras. Por lo tanto, el propósito de este trabajo es describir algunos modelos computacionales que permitan simular la difusión de carbono dentro del acero, con objeto de crear las bases de un controlador de un proceso industrial.

Capítulo 2

Revisión de la literatura

2.1 Difusión

La difusión desempeña un papel rector en muchos procesos que determinan la estructura y las propiedades de los materiales. Es un proceso de nivelación espontánea de la concentración [2]. Es además, un proceso elemental en el sentido que se realiza gracias al desplazamiento de diversas partículas (átomos, vacancias, etcétera). Debido a que se lleva a cabo a nivel atómico es útil en la investigación de la estructura de los metales.

La difusión es uno de los procesos más comunes en los sólidos, se produce en metales puros y en aleaciones en una gama amplia de temperaturas y condiciones externas. La razón que provoca el desplazamiento de los átomos durante la difusión es la diferencia de potenciales químicos en distintos puntos del sistema. Sin embargo, como ya se mencionó, la descripción del proceso puede realizarse considerando al gradiente de concentración como la fuerza motriz del proceso dada la relación que existe entre el potencial químico y la composición.

2.1.0.1 Leyes de Fick

Las ecuaciones básicas de la difusión fueron escritas por Fick en 1855. Estas ecuaciones fueron desarrolladas considerando la analogía del movimiento difusivo con el transporte de calor. Por esta razón, desde el punto de vista matemático, puede usarse la ley de Fourier para la conducción de calor para establecer una ecuación análoga para la transferencia de masa en un sólido. Esta ecuación se conoce como 1a. ley de Fick.

La primera ley de Fick describe la rapidez de transferencia de soluto a través de una superficie S , la expresión matemática de esta ley es:

$$J_x = -D \frac{dC}{dx} \quad (2.1)$$

Donde J_x representa al flux de soluto, D es la difusividad del soluto en el solvente, C es la concentración de soluto y x representa la dirección del flux.

La segunda ley de Fick describe la variación de la concentración de la sustancia que difunde en el espacio y en el tiempo, la expresión matemática correspondiente es:

$$\frac{\partial C}{\partial t} = D \frac{\partial^2 C}{\partial x^2} \quad (2.2)$$

Esta expresión implica las siguientes suposiciones:

- Coeficiente de difusión constante, independiente de la temperatura y la composición
- Transferencia de masa unidireccional
- Estado inestable
- No existe reacción química en el proceso
- El único mecanismo de transporte es la difusión (sólido)

La difusión es altamente sensible a la estructura, esto significa que la velocidad de desplazamiento de los átomos de soluto depende considerablemente de la disposición de los átomos en la red del solvente. Por ejemplo, en una estructura BCC los huecos entre átomos son mayores que para una estructura FCC, por esta razón la rapidez a la que un átomo intersticial puede desplazarse en una red BCC será mayor que en una red FCC.

2.1.0.2 Carburización de aceros

Una de las aplicaciones más importantes de los principios de la difusión en el contexto de la metalurgia es la que implica el proceso de carburización de los aceros. Este proceso consiste en introducir carbono a la superficie de una pieza de acero con el fin de aumentar su resistencia al

desgaste. El mecanismo por el cual se transporta el carbono hacia el interior de la pieza es la difusión.

Los sistemas de manufactura que emplean la carburización dependen de diversos pasos básicos [1]:

- Preparación del acero (operaciones de acabado primario que determinan la microestructura inicial y la dureza)
- Fabricación de partes (Forja, maquinado, etcétera)
- Carburización, temple.
- Operaciones de acabado final (Pulido de partes endurecidas)

La atención que debe darse a los pasos del tratamiento termoquímico depende en varias ocasiones de la naturaleza de las piezas. Estas, pueden ser sometidas a operaciones de acabado posteriores al tratamiento para el control dimensional. En estos casos, cuando durante las etapas del tratamiento se comete un descuido se puede incidir directamente en la calidad final de la pieza: El pulido posterior al tratamiento puede ocasionar la remoción de la capa carburada. Por lo tanto, es necesario controlar la operación de carburización con el fin de obtener una superficie con un espesor de capa carburada, tal que no afecte la operación de acabado superficial final.

Otro aspecto de suma importancia que influye en el éxito de un tratamiento como la carburización es la selección de la aleación que será sometida al proceso. Si el material no es cuidadosamente seleccionado pueden surgir inconvenientes tales como el fenómeno de expansión térmica durante un tratamiento termoquímico.

La carburización puede realizarse por medio de un gas carburizante, con plasma [3], en un baño de sales o en una cama empacada. La mayoría de las partes carburizadas son procesadas mediante carburización con gas, usando gas natural, propano o butano como fuente de carbono. La carburización con gases puede realizarse como un proceso continuo o intermitente. En los hornos intermitentes pueden programarse los cambios en la temperatura del horno y el potencial

de carbono en la atmósfera con el tiempo, limitados únicamente a la velocidad de enfriamiento y/o calentamiento del horno y a la velocidad a la que la atmósfera del horno puede ser purgada. Por otra parte, los hornos continuos no ofrecen esta flexibilidad. El carbono difunde en un acero a altas temperaturas para periodos de tiempo de unas horas hasta días.

2.2 Modelado matemático

Existen varias complicaciones en la descripción matemática mecanística del proceso de carburización, por ejemplo:

- El coeficiente de difusión es una función de la concentración y por lo tanto de la fase microestructural involucrada.
- El coeficiente de difusión es una función de la temperatura.
- La composición del medio carburante, es decir el contenido superficial de carbono, varía con el tiempo.
- Las concentraciones de otros solutos son considerables y causan efectos sobre la difusión del carbono.

El modelo matemático debe tomar en cuenta todos estos factores. Siendo éste el caso, la matemática que describe el fenómeno suele consistir de ecuaciones diferenciales parciales no lineales, con condiciones a la frontera no homogéneas y no lineales. La solución de estas ecuaciones no es fácil y generalmente se requiere de la aplicación de técnicas no convencionales. Por lo que, en general, la solución de este problema matemático se lleva a cabo por medio de la aplicación de métodos numéricos, los cuales permiten obtener una solución aproximada de gran utilidad práctica [1].

Una solución analítica puede ser recomendable para problemas simples, y frecuentemente para situaciones más complicadas puede emplearse para verificar una solución numérica bajo condiciones especiales. Sin embargo, dado el problema, es notorio que obtener una solución

analítica es una tarea bastante compleja y por lo tanto, es recomendable hacer uso de un método numérico. Una solución numérica transforma la ecuación diferencial en una algebraica y los valores de la variable dependiente están determinados a intervalos discretos de espacio y/o tiempo [5].

2.2.1 Métodos numéricos

La base matemática de los métodos numéricos puede observarse considerando la definición de la primera derivada [5]:

$$\frac{dy}{dx} \Big|_x = \lim_{\Delta x \rightarrow 0} \frac{y|x+\Delta x - y|x}{\Delta x} \quad (2.3)$$

Donde la variable dependiente está disponible solamente en nodos separados por intervalos finitos de espacio o tiempo. La derivada debe aproximarse tal que:

$$\frac{dy}{dx} \Big|_{x_i} \approx \frac{y|x_{i+1} - y|x_i}{\Delta x} \quad (2.4)$$

donde x_i y y_i son las variables independiente y dependiente respectivamente en el nodo designado i y $\Delta x = x_{i+1} - x_i$. Esta aproximación de diferencia finita es llamada frecuentemente 'diferencia hacia adelante'. Otras aproximaciones comunes de diferencias finitas son:

- Diferencia central

$$\frac{dy}{dx} \Big|_{x_i} \approx \frac{y|x_{i+1} - y|x_{i-1}}{2 \Delta x} \quad (2.5)$$

- Diferencia hacia atrás

$$\frac{dy}{dx} \Big|_{x_i} \approx \frac{y|x_i - y|x_{i-1}}{\Delta x} \quad (2.6)$$

De manera similar para la segunda derivada:

$$\frac{d^2 y}{dx^2} \Big|_{x_i} \approx \frac{y|_{x_{i+1}} - 2y|_{x_i} + y|_{x_{i-1}}}{(\Delta x)^2} \quad (2.7)$$

Las aproximaciones contienen un error de truncación debido a que se toma un número finito de términos en la expansión de Taylor. Recuerdese que la derivada es continua puede representarse como un polinomio de n términos, una diferencia finita como las expuestas arriba considera solo el primer término de la serie que fué truncada para simplificar el problema.

Existen varios esquemas de diferencias finitas. Los más usados son las diferencias finitas explícitas y las diferencias finitas implícitas. Se utilizarán:

- Diferencias finitas explícito (DFE)
- Diferencias finitas implícito (DFI)
- Crank Nicholson (CN) ¹

Estas técnicas numéricas hacen uso de iteraciones para encontrar la solución de un determinado problema. En el siguiente párrafo se describen algunas características generales de las técnicas numéricas, y en las secciones siguientes se hará una descripción de cada una de ellas.

Estos métodos poseen características como: estabilidad, consistencia y convergencia. La estabilidad numérica de un método se refiere al crecimiento inestable o decaimiento estable de los errores en las operaciones aritméticas necesarias para resolver las ecuaciones de diferencias finitas. Estos errores se originan a partir del trabajo requerido para realizar una iteración, es decir, el número de operaciones aritméticas que debe realizar la computadora por cada iteración. Cada vez que se realice una, se generará un error de redondeo por la computadora, y su magnitud dependerá de cuantas operaciones realice por iteración y del número de iteraciones necesarias para que la solución numérica converja. El que estos errores se amplifiquen o decaigan, caracterizan la estabilidad de un esquema de diferencias finitas. Se dice que un método

¹Esta es una técnica implícita

es "condicionalmente estable" cuando es necesario cumplir con alguna restricción para evitar el crecimiento del error. Un método es "incondicionalmente estable", cuando no existe condición para evitar el crecimiento del error.

Se dice que una ecuación de diferencias finitas es consistente con la ecuación diferencial si el error de truncación tiende a cero conforme el espaciado espacial o temporal, según sea el caso, tienden a cero. En otras palabras, la consistencia implica que la ecuación en diferencias finitas represente exactamente la ecuación diferencial que se desea resolver. En cuanto a la convergencia se ha observado [15] que si el esquema es consistente y además estable, entonces la solución numérica deberá converger necesariamente, es decir, aproximarse a la solución real.

2.2.2 Método Explícito (DFE)

En la formulación explícita, la derivada: $\frac{\partial^2 U}{\partial x^2}$, está expresada en términos de la variable dependiente conocida al paso de tiempo presente. Es decir, considera valores de propiedad conocidos a priori para evaluarla a un instante de tiempo futuro en cualquier posición i . Estos nuevos valores de propiedad sirven como entrada a un cálculo posterior, y así sucesivamente hasta que se alcance el tiempo final al cual se desea conocer el valor de la propiedad en cada posición.

El método explícito presenta un inconveniente que reside en la elección del intervalo de tiempo que se usará durante el cálculo de propiedad. Es un método condicionalmente estable, por lo que el Δt (intervalo de tiempo) debe determinarse a partir del valor del coeficiente del nodo i en el tiempo "presente" indicado en la ecuación algebraica correspondiente a ese nodo. Para ilustrar lo anteriormente dicho véase lo siguiente:

Sea la ecuación diferencial:

$$\frac{d^2 y}{dx^2} |_{x_i} = \frac{dy}{dt} |_{x_i} \quad (2.8)$$

su correspondiente expresión algebraica será:

$$\frac{y |_{x_{i+1}}^t - 2 y |_{x_i}^t + y |_{x_{i-1}}^t}{(\Delta x)^2} = \frac{y |_{x_i}^{t+1} - y |_{x_i}^t}{\Delta t} \quad (2.9)$$

Note que en este caso y depende de la dimensión x y del tiempo t . Los intervalos o particiones (diferencias) espaciales están representados por Δx y los intervalos temporales por Δt . La localización del nodo en la dimensión x (nodo espacial) está dada por el subíndice i . Similarmente, el valor de y en el nodo espacial i y sus fronteras en el espacio temporal está dada por t , este superíndice representa el número de iteración.

rearrreglando la expresión algebraica se tendrá:

$$\frac{y|_{x_{i+1}}^t}{(\Delta x)^2} - \frac{2y|_{x_i}^t}{(\Delta x)^2} + \frac{y|_{x_{i-1}}^t}{(\Delta x)^2} = \frac{y|_{x_i}^{t+1}}{\Delta t} - \frac{y|_{x_i}^t}{\Delta t} \quad (2.10)$$

agrupando los términos comunes de la ecuación se obtiene:

$$y|_{x_i}^{t+1} = y|_{x_i}^t \left(1 - \frac{2\Delta t}{\Delta x^2}\right) + \frac{\Delta t}{\Delta x^2} (y|_{x_{i+1}}^t + y|_{x_{i-1}}^t) \quad (2.11)$$

En esta ecuación se observa que el coeficiente correspondiente al nodo i es: $\left(1 - \frac{2\Delta t}{\Delta x^2}\right)$. Este coeficiente involucra el intervalo de tiempo, y es condición para DFE que su valor sea mayor que cero, a esta condicional se le conoce como criterio de estabilidad. De no cumplirse esta restricción, el método generaría resultados erróneos.

Dado que existe una ecuación para cada nodo espacial, existirá también un coeficiente por cada ecuación. Consecuentemente cambiarán los posibles valores que debe tomar el intervalo de tiempo. Por esta razón, es necesario comparar los diferentes Δt 's y determinar cual es el menor ya que si se cumple ese criterio los demás deberán cumplirse necesariamente. A el mínimo valor de Δt encontrado se le llama intervalo de tiempo más restrictivo y debe determinarse con el fin de cumplir todos los criterios de estabilidad.

2.2.3 Métodos Implícitos (DFI y CN)

El esquema implícito no recurre a los valores de propiedad conocidos. Para este esquema el valor de la propiedad es desconocido en cualquier lugar de la malla (excepto al inicio). Esto conduce a que se genere un sistema de n ecuaciones con n incógnitas. El conjunto de ecuaciones obtenido bajo un esquema implícito (DFI o CN) forma una matriz tridiagonal que debe resolverse para

encontrar los valores de propiedad en cada paso de tiempo [15]. Para resolver la matriz debe utilizarse un método numérico apropiado. La gran virtud de las técnicas implícitas es que el valor de Δt no está limitado al criterio de estabilidad impuesto sobre el método explícito, es decir, son incondicionalmente estables. Sin embargo, las técnicas implícitas son más difíciles de programar pues debe implementarse un programa que resuelva la matriz ya mencionada.

El procedimiento para encontrar las expresiones algebraicas correspondientes a este esquema es similar al utilizado en el esquema explícito, solo que en este caso las ecuaciones están expresadas al tiempo desconocido o futuro $t + 1$. Es decir, la propiedad y es desconocida en cualquier posición espacial. La expresión algebraica de la ecuación 2.8 para el nodo espacial i en el esquema implícito será:

$$\frac{y|_{x_{i+1}}^{t+1}}{(\Delta x)^2} - \frac{2y|_{x_i}^{t+1}}{(\Delta x)^2} + \frac{y|_{x_{i-1}}^{t+1}}{(\Delta x)^2} = \frac{y|_{x_i}^{t+1}}{\Delta t} - \frac{y|_{x_i}^t}{\Delta t} \quad (2.12)$$

En los métodos implícito y explícito simples, la derivada del tiempo se aproxima con una simple diferencia hacia adelante. El error asociado a esta aproximación puede reducirse cambiando a una diferencia central al punto medio del intervalo de tiempo, esta es la base del método Crank Nicholson.

2.2.4 Discretización

La discretización consiste en dividir en intervalos discretos al sistema bajo estudio. En esta etapa solo se involucra a las variables espaciales ²: x , y o z .

Una vez que se ha dividido el sistema, se asigna un 'nodo' a cada elemento. La posición del nodo indica la distancia a la que se evaluará la variable dependiente (contenido de carbono en este caso). El nodo tiene un cierto espesor (Δx) y se presupone que todo el elemento tiene el mismo valor de propiedad.

Es recomendable al realizar la discretización, que el espesor del elemento de balance representativo de la frontera tenga la mitad del espesor de un elemento central, ya que cuando

²La discretización temporal estará determinado por el método numérico empleado

los marcadores que representan un elemento de balance (nodos) se colocan en la mitad del espesor del elemento, se obliga a que las distancias internodales sean iguales y se facilita la implementación de los métodos numéricos a un programa de cómputo.

2.2.5 Norma Euclidiana

El cálculo de la norma euclidiana es un método para evaluar la efectividad de un método iterativo. La norma euclidiana es la magnitud del vector error generado al comparar los valores predichos por un método numérico iterativo y los valores esperados conocidos a priori. Este método evalúa la magnitud del error total generado durante la obtención de la solución numérica. Por lo tanto, cuanto menor sea el valor de la norma euclidiana mayor será la aproximación del método.

La norma euclidiana se define como:

$$\|C_E\| = \sqrt{\frac{\sum (C_{predicha} - C_{esperada})^2}{N}} \quad (2.13)$$

Esta ecuación corresponde a la norma euclidiana modificada puesto que la ecuación normal no incluye el número de puntos comparados N . Para ilustrar la importancia de esta modificación, considérese que se tienen dos conjuntos de datos en los cuales, la diferencia entre cada uno de sus elementos y los valores esperados es la misma para ambos conjuntos, y la única diferencia es que uno de los conjuntos consta de 10 elementos y otro de 20. Como se puede percibir, ambos conjuntos poseen un error de igual magnitud. Sin embargo, dado que en el segundo caso el número de elementos del conjunto es más grande, el resultado de la sumatoria alterará la magnitud del error. Obsérvese que al dividir la suma entre el número de elementos utilizados en la evaluación de la norma, la magnitud de ésta será independiente del número de datos empleados en su determinación.

Capítulo 3

Desarrollo del modelo

3.1 Descripción de la carburización

La carburación, como se vió en la revisión de la literatura, es un proceso que modifica la resistencia superficial al desgaste en los aceros. Consiste en introducir carbono en la superficie y hasta un cierto espesor por debajo de ella, con el fin de aumentar la dureza. Este proceso involucra principalmente al mecanismo de difusión en sólido. En la sección siguiente se describe el fenómeno de la difusión de carbono en aceros.

3.1.1 Difusión de carbono en aceros

Al inicio del tratamiento la composición química del acero es totalmente homogénea. Para promover la difusión del carbono en el metal se debe originar una diferencia de concentración entre la superficie y el interior de la pieza. La concentración de carbono en la superficie debe necesariamente ser mayor que la concentración original del acero.

Una referencia útil para realizar una carburización es el diagrama de fases Fe-C. En este diagrama aparecen las fases estables del acero a diferentes temperaturas y los contenidos de carbono máximos que se pueden introducir en la aleación bajo esas condiciones.

El tratamiento de carburización inicia con la elevación de la temperatura del acero hasta que se asegure que la fase estable es la austenita. En esta fase, la solubilidad de carbono en hierro aumenta significativamente, y el aumento de dureza que se pretende con la carburización sucede como resultado de incrementar el contenido carbono en el acero. Posteriormente, la pieza se pone en contacto con una atmósfera cuyo contenido de carbono es elevado en comparación con el contenido en el acero. La intercara sólido-gas alcanza el equilibrio y por consiguiente

la superficie del metal tendrá un contenido de carbono igual al potencial del elemento en la atmósfera.

Dado que es necesario crear una diferencia de concentración puede suponerse que la fuerza motriz de la difusión es la diferencia de concentraciones en distintos puntos del sistema. Sin embargo, no debe olvidarse que la razón que provoca el desplazamiento de los átomos durante la difusión es la diferencia de potenciales químicos.

Al transcurrir el tiempo, el carbono penetra cada vez más, disminuyendo paulatinamente el gradiente de concentración. A una distancia finita por debajo de la superficie del metal los efectos del alto contenido de carbono superficial ya no son relevantes y la pieza conserva su composición química original; a la distancia en que esto ocurre se le denomina espesor de capa carburada. El espesor de capa carburada tiene una gran importancia, es un estándar específico que depende de las operaciones de acabado final y de las condiciones de trabajo a las que será sometida la pieza después del tratamiento.

3.2 Formulación matemática de la difusión

Particularmente y según se explicó en la parte introductoria, se formularán matemáticamente dos diferentes tipos de condiciones de operación:

- Considerando que el coeficiente de difusión y el contenido superficial de carbono en la pieza permanecen constantes bajo condiciones isotérmicas.
- Considerando que el coeficiente de difusión y el contenido superficial de carbono varían con el tiempo bajo condiciones no isotérmicas.

Lo primero servirá para validar el método de solución, lo segundo es el modelo matemático en sí.

3.2.1 Suposiciones

Las suposiciones generales aplicables a ambos casos ¹ son:

- Flujo de carbono unidireccional. La carburización es un proceso cuyo efecto es notorio a niveles pequeños dimensionalmente hablando. El espesor de capa carburada es muy pequeño comparado con la dimensión total de la pieza. Por lo tanto, el flujo es necesariamente unidireccional. De aquí se deriva también que la geometría de las piezas a carburar pueda ser considerada irrelevante. Si a una dimensión pequeña la dividimos en partes más pequeñas (Se están dividiendo longitudes de 2 a 3 mm) la diferencia entre las áreas de transferencia una vez que el carbono penetra a una determinada pieza, es prácticamente nula. Por lo tanto, se considera que las áreas de transferencia no varían conforme se avanza hacia el interior de una pieza, o que la variación es tan pequeña que puede despreciarse.
- Difusividad dependiente de concentración y Temperatura. En la literatura se encuentra que la capacidad de transporte de carbono en un acero está influenciada por el contenido del elemento en su red cristalina. El carbono ocupa los sitios intersticiales en la red cristalina del acero, así que cuanto más carbono exista en la red menor será la probabilidad de que algún otro átomo externo pueda entrar. Consecuentemente, la difusividad será menor o mayor según sea el contenido de carbono inicial en el acero. Por otro lado, los cambios en la temperatura generan un movimiento atómico mayor en la red. Estas vibraciones atómicas aumentan la probabilidad de salto de los átomos, ya sea por medio de vacancias o de intersticios, bajo esta perspectiva se puede afirmar que la difusividad es sensible a los cambios de la temperatura.
- Estado inestable. Durante una carburización necesariamente ocurren cambios en el contenido de carbono y en la temperatura como función del tiempo. A las variaciones de

¹La única excepción es la segunda suposición, aplicable solo en el segundo caso

propiedad en el tiempo se les denomina procesos inestables; en consecuencia la carburización puede considerarse como un proceso inestable.

- **Unico mecanismo de transporte: Difusión en una sola fase.** La temperatura a la cual se realiza la carburización está en un rango cuyo límite inferior es la temperatura de austenización del acero de que se trate, y cuyo límite superior no rebaze alguna línea de transformación de fase. En este rango de temperatura la fase estable: austenita, ofrece la mayor solubilidad de carbono del acero. Por lo tanto, idealmente la pieza debería ponerse en contacto con la atmósfera carburante solo hasta que alcance la temperatura de austenización.
- **Inexistencia de gradientes térmicos en la pieza.** Esta suposición es totalmente válida para piezas de tamaño pequeño. En el caso de piezas de mayor tamaño es posible que se genere un gradiente de temperatura, pero este puede considerarse despreciable ya que durante el tratamiento, se permite que la temperatura en cualquier punto de la pieza se encuentre en el rango de trabajo.
- **Ausencia de cambios dimensionales en la pieza debidos al tratamiento térmico.** La carburización es un tratamiento que implica un estricto control dimensional. Por lo tanto, los materiales (aceros) utilizados en la fabricación de piezas que serán sometidas a carburización, deben tener como característica una baja expansión y/o contracción térmica, de manera que cualquier cambio dimensional debido al tratamiento térmico sea despreciable.
- **Autodifusión despreciable.** La autodifusión implica que los átomos de Fe se muevan a través de los sitios intersticiales en la red, o bien, que el movimiento se realice debido a la presencia de vacancias. Sin embargo, debido a que el carbono tiene un tamaño atómico menor al Fe, la probabilidad de que un átomo de carbono ocupe un sitio intersticial será mayor a la probabilidad de que el sitio sea ocupado por un átomo de Fe. Además de la energía necesaria para efectuar el salto, introducir un átomo de Fe en un intersticio ocasionaría deformación. Por otro lado, la velocidad de transporte de átomos de Fe

a través de las vacancias es despreciable comparada con la velocidad de transporte de carbono en los intersticios de la red cristalina.

3.2.2 Formulación matemática para un tratamiento donde el coeficiente de difusión es una constante

$$D_{C-\gamma} \frac{\partial}{\partial x} \left(\frac{\partial C_C}{\partial x} \right) = \frac{\partial C_C}{\partial t} \quad (3.14)$$

Condición inicial

$$t = 0 \quad 0 \leq x \leq L \quad C_C = C_{C_{\text{acero}}} \quad (3.15)$$

Condiciones a la frontera

$$0 < t \leq \tau \quad x = 0 \quad C_C = C_{te}. \quad (3.16)$$

$$0 < t \leq \tau \quad x = L \quad C_C = C_{C_{\text{acero}}} \quad (3.17)$$

3.2.3 Formulación matemática para un tratamiento donde el coeficiente de difusión es una función de la composición y el tiempo

$$\frac{\partial}{\partial x} \left(D_{C-\gamma} \frac{\partial C_C}{\partial x} \right) = \frac{\partial C_C}{\partial t} \quad (3.18)$$

Condición inicial

$$t = 0 \quad 0 \leq x \leq L \quad C_C = C_{C_{\text{acero}}} \quad (3.19)$$

Condiciones a la frontera

$$0 < t \leq \tau \quad x = 0 \quad C_C = f(t) \quad (3.20)$$

$$0 < t \leq \tau \quad x = L \quad C_C = C_{C_{\text{acero}}} \quad (3.21)$$

El coeficiente de difusión empleado para este caso fué determinado por Wells y Mehl [4].

3.3 Solución del modelo

3.3.1 Técnicas numéricas

Se eligieron tres diferentes técnicas numéricas para obtener la solución del modelo ²:

- Diferencias Finitas Explícito (DFE)
- Diferencias Finitas Implícito (DFI)
- Método de Crank Nicholson (CN)

Recuerdese que tanto el método DFI y CN son incondicionalmente estables, el explícito por otra parte debe satisfacer el criterio de estabilidad para evitar la generación de resultados erróneos.

3.3.2 Discretización del sistema

En la Figura 3.1 se muestra la discretización del sistema utilizada en este trabajo. Se colocaron nodos en los puntos de interés como son las fronteras físicas y puntos equidistantes a éstas.

Debido a las condiciones de frontera impuestas, el balance más interesante a realizar es el correspondiente a los nodos internos. La forma general de la ecuación se obtiene realizando un balance sobre un nodo interno i .

Los flujos másicos considerados en el balance se muestran esquemáticamente en la Figura 3.2.

²Los fundamentos de cada una de las técnicas se describen en la revisión bibliográfica

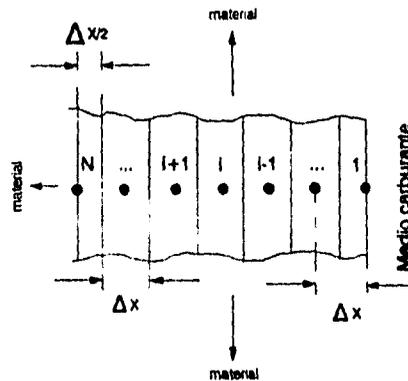


Figura 3.1: Esquema de la discretización del sistema

Ecuaciones de diferencias finitas

A continuación se enlistan las ecuaciones representativas de las fronteras y de los nodos internos para cada método numérico. La deducción detallada de las ecuaciones a partir de las expresiones de los balances se anexa en el Apéndice A.

Es importante mencionar que en los métodos DFI y CN la numeración de los nodos comienza con el número 1, esto es debido a que el algoritmo que resuelve la matriz tridiagonal³ generada por estos métodos lo requiere; en caso contrario se ocasionaría un error en la ejecución del programa. En el caso del método DFE puede iniciarse desde cero o uno indistintamente.

³Se ampliará la información en la siguiente sección

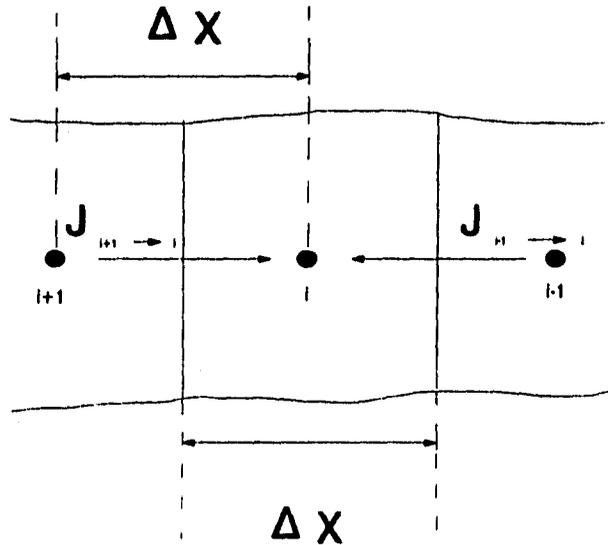


Figura 3.2: Balance para un nodo interno

3.3.2.1 Diferencias finitas explícito

Frontera superficial (Nodo 0).

$$C_0^{t+1} = C_s = f(t) \quad (3.22)$$

Frontera interior (Nodo N-1).

$$C_{N-1}^{t+1} = C_{acero} \quad (3.23)$$

Nodos internos

$$C_i^{t+1} = (1 - 2 \Delta F_0) C_i^t + \Delta F_0 (C_{i-1}^t + C_{i+1}^t) \quad (3.24)$$

3.3.2.2 Diferencias finitas implícito

Frontera exterior (Nodo 1).⁴

$$C_1^{t+1} = C_s = f(t) \quad (3.25)$$

Frontera interior (Nodo N).

$$C_N^{t+1} = C_{C_{acero}} \quad (3.26)$$

Nodos internos

$$C_{i-1}^{t+1} - C_i^{t+1} \left(2 + \frac{1}{\Delta Fo} \right) + C_{i+1}^{t+1} = -C_i^t \frac{1}{\Delta Fo} \quad (3.27)$$

3.3.2.3 Crank Nicholson

Frontera exterior (Nodo 1).

$$C_1^{t+1} = C_s \quad (3.28)$$

Frontera interior (Nodo N).

$$C_N^{t+1} = C_{C_{acero}} \quad (3.29)$$

Nodos internos

$$a = \left(\frac{1}{2} - \frac{1}{2 \Delta Fo} - \Delta Fo \right) \quad (3.30)$$

$$b = \frac{\Delta Fo}{2} \quad (3.31)$$

$$\frac{1}{2} C_{i-1}^{t+1} - C_i^{t+1} \left(\frac{1}{2} + \frac{1}{2 \Delta Fo} \right) + \frac{1}{2} C_{i+1}^{t+1} = a * C_i^t + b * (C_{i-1}^t + C_{i+1}^t) \quad (3.32)$$

⁴Recuerdese que la concentración superficial C_s cambia con el tiempo.

3.3.3 Solución de los sistemas de ecuaciones algebraicas generados por DFI y CN

Tanto el método DFI como el CN generan una matriz tridiagonal que debe resolverse para obtener la solución en cada paso de tiempo. Se utilizó un método numérico conocido como Algoritmo de Thomas para encontrar dicha solución.

Para aplicar el método deben identificarse los coeficientes de las incógnitas (concentraciones al tiempo $t + 1$), y el vector de términos constantes del sistema de ecuaciones. En la Figura 3.3 se muestra el arreglo de la matriz y la notación para cada elemento empleada en el modelado.

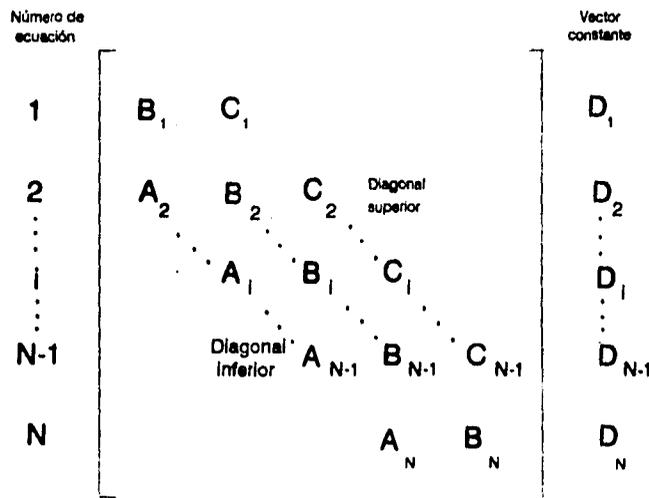


Figura 3.3: Matriz Tridiagonal

Para ejemplificar lo anteriormente dicho se hará uso de la ecuación correspondiente a un nodo interno obtenida bajo el esquema Implícito y sus respectivas ecuaciones de las fronteras.

Ecuación para un nodo interno (DFI)

$$C_{i-1}^{t+1} - C_i^{t+1} \left(2 + \frac{1}{\Delta F_0} \right) + C_{i+1}^{t+1} = -C_i^t \frac{1}{\Delta F_0} \quad (3.33)$$

- Elementos de la diagonal inferior (coeficiente del nodo i-1). Denotados como A_i

$$A_i = 1 \quad (3.34)$$

- Elementos de la diagonal principal (coeficiente del nodo i). Denotados como B_i

$$B_i = - \left(2 + \frac{1}{\Delta F_0} \right) \quad (3.35)$$

- Elementos de la diagonal superior (coeficiente del nodo i+1). Denotados como C_i^5

$$C_i = 1 \quad (3.36)$$

- Elementos del vector constante. Denotados como D_i

$$D_i = - \frac{1}{\Delta F_0} C_i^t \quad (3.37)$$

Nodos frontera

Nodo 1

$$A_1 = 0$$

$$B_1 = 1$$

$$C_1 = 0$$

$$D_1 = C_s$$

⁵No confundir con concentración. Para diferenciar, observe que la variable concentración está especificada en el tiempo.

$$\begin{aligned} \text{Nodo } N \\ A_N &= 0 \\ B_N &= 1 \\ C_N &= 0 \\ D_N &= C_{C_{\text{acero}}} \end{aligned}$$

De manera similar se procede con las ecuaciones obtenidas con el método de Crank Nicholson. Estas ecuaciones, se integran a los programas en un procedimiento que resuelve el algoritmo de Thomas. En la siguiente sección se hará una breve descripción de los programas y su elaboración.

3.3.4 Programas de cómputo

Las ecuaciones de la difusión en el proceso de carburización obtenidas a partir de las técnicas numéricas, se implementaron como varios programas de cómputo en lenguaje Turbo Pascal. Los listados de los programas se encuentran en los apéndices B. Los programas reciben información sobre las condiciones del proceso como:

- Temperatura de tratamiento. En los casos donde las condiciones de operación no son isotérmicas, se debe proporcionar la información necesaria para que el programa realice los cambios de temperatura en función del tiempo.
- Contenido de carbono en el acero antes del tratamiento.
- Contenido de carbono en la superficie de la pieza a tratar.
- Distancia de penetración. El valor de este parámetro puede ser igual al indicado en la literatura que es un valor real de capa carburada, o bien, puede proponerse una distancia de penetración mayor para observar el comportamiento del perfil en la frontera interna.

Además de la información referente a las condiciones de operación durante el tratamiento, también se debe proporcionar información necesaria para que el programa realice el cálculo de los perfiles de concentración, esta información es:

- Número de nodos espaciales que define el número de particiones que tendrá el sistema.
- Intervalo de tiempo virtual que cumpla con el criterio de estabilidad en el caso que se use DFE (Los programas realizan cálculos cada vez que transcurre un intervalo de tiempo).
- Tiempos virtuales a los que se desea que el programa muestre el perfil de concentraciones calculado.

Finalmente, los resultados arrojados por los simuladores son:

- Perfil de concentraciones.

Puesto que la discretización utilizada en la obtención de la solución numérica no corresponde con la utilizada en la obtención de la solución analítica y los datos experimentales reportados en la literatura, se desarrolló un programa para interpolar linealmente los valores de concentración de carbono predichos por cada uno de los métodos. De esta manera, se puede obtener el valor de la concentración predicha por el método numérico en la misma posición en que se evaluó la solución analítica y/o se realizaron las mediciones experimentales. El programa recibe el nombre de INTERPOLACION y se anexa en el Apéndice B.

El programa que realiza la interpolación hace uso de los archivos que contienen la solución analítica y/o los datos experimentales (posiciones) y los perfiles generados con los programas (concentraciones y posiciones). Los programas guardan los resultados de la interpolación en otro archivo para su posterior uso.

La interpolación lineal es un método válido para este caso dado que el espaciamiento internodal es extremadamente pequeño.

Se elaboró otro programa auxiliar para evaluar el error en términos de la norma euclidiana ⁶. El programa NORMA evalúa el error generado con cada método numérico tomando la solución analítica y/o los datos experimentales como parámetros comparativos. Este programa lee los

⁶Esta se puede definir como $\|C_E\| = \sqrt{\sum (C_{predicha} - C_{analitica})^2}$, para N pares de datos predichos y analíticos, en la misma posición y tiempo virtual.

archivos generados por la interpolación y aquellos que contienen las concentraciones calculadas con la solución analítica y/o determinadas experimentalmente.

Los listados de estos programas se incluyen en el Apéndice B

3.4 Validación de las técnicas numéricas

Como se explicó con anterioridad, para verificar la eficacia de los métodos numéricos se elaboró un programa que simula un problema de difusión cuya ecuación puede resolverse analíticamente. El primer paso en la tarea de validar las técnicas numéricas es la determinación del espaciamiento internodal e intervalo de tiempo que deben usarse como entrada al correr los programas. Estos parámetros deben elegirse de manera que generen un error mínimo.

Los programas INTERPOLACION y NORMA se aplican a los conjuntos de datos generados usando diferentes espaciamientos internodales para realizar la validación del método de solución. Los resultados se comparan de manera tabular para identificar cual es el número de nodos óptimo, es decir, la discretización que genera el error más pequeño. Posteriormente se realiza una comparación del error generado por cada método, para identificar cual de los tres predice los resultados más aproximados a la solución analítica.

3.4.1 Evaluación del intervalo de tiempo y el espaciamiento internodal

3.4.1.1 Intervalo de tiempo

En el caso del método DFE, el intervalo de tiempo se encuentra restringido. Este método requiere que se cumpla la condición de que el valor numérico del coeficiente de la concentración presente del nodo en el cual se está realizando el balance (C_i^t) sea mayor que cero. Así se asegura la estabilidad del cálculo y se evita la generación de resultados erróneos. Por lo anterior, el intervalo de tiempo se determinó solo en base a las restricciones impuestas por éste método.

Se calcularon los criterios de estabilidad correspondientes con los siguientes números de nodos: 15, 60, 125, 500 y 1000 nodos espaciales. El intervalo de tiempo más restrictivo del nodo i , se determina a partir del coeficiente de la concentración C_i^t en la expresión algebraica

obtenida del balance sobre dicho nodo, ver ec. 3.24. Sin embargo, dado que el intervalo de tiempo depende significativamente de la cantidad de nodos que se desee colocar en el sistema, debe demostrarse que si se elige adecuadamente el número de nodos que dará origen a la malla, se podrá determinar al mismo tiempo cual es el intervalo de tiempo más conveniente.

El programa se corrió con la siguiente información: distancia de penetración de 1.5 mm, temperatura de tratamiento igual a 1273 K, contenido superficial de carbono constante e igual a 1.5 % en peso, contenido de carbono antes del tratamiento igual a 0.2 % en peso y un coeficiente de difusión constante e igual a $3 \times 10^{-11} \frac{m^2}{s}$.

3.4.1.2 Espaciamiento internodal

En la determinación del espaciamiento internodal se utilizó un intervalo de tiempo constante correspondiente a una malla de 1000 nodos independientemente de los valores usados en las pruebas. Con esto, se espera lograr la minimización del posible error que pudiera generarse por efecto de éste parámetro. Las mallas probadas fueron 15, 60, 125, 500 y 1000 nodos usando el método DFE.

Una vez determinado el espaciamiento que se usará, debe recalcularse el intervalo de tiempo correspondiente que cumpla con el criterio de estabilidad del método DFE. Ambos valores se usan como entrada en los programas que simulan tratamientos de carburización cuya solución analítica no es directa.

3.4.2 Comparación entre los métodos

Se realizó una corrida prueba con el fin de determinar cual de los métodos es el más aproximado a la solución analítica. Se utilizó para ello, los mismos valores de parámetros en cada programa: 500 nodos espaciales ⁷, distancia de penetración de 2 mm, temperatura de tratamiento igual a 1273 K, contenido superficial de carbono constante e igual a 1.5 % en peso, contenido de carbono antes del tratamiento igual a 0.2 % en peso y un coeficiente de difusión constante e igual a $3 \times 10^{-11} \frac{m^2}{s}$.

3.5 Validación del modelo

La validación del método de solución mediante los procedimientos anteriormente descritos, conduce finalmente a su utilización para modelar un tratamiento de carburización complejo; es decir, bajo condiciones isotérmicas y donde además el coeficiente de difusión y el contenido superficial de carbono en el metal son dependientes del tiempo.

Con objeto de validar el modelo se eligieron tres tratamientos con diferentes condiciones de operación.

3.5.1 Tratamientos modelados

Los perfiles experimentales de cada uno de estos tratamientos se encuentran en la literatura [11]. Las figuras 3.4 , 3.5 y 3.6 describen los tratamientos de manera gráfica.

Para poder simular las variaciones de temperatura y contenido superficial de carbono en el acero como una función del tiempo se recurrió a las gráficas representativas de cada tratamiento.

⁷Valor arbitrario para ilustrar las diferencias entre los métodos

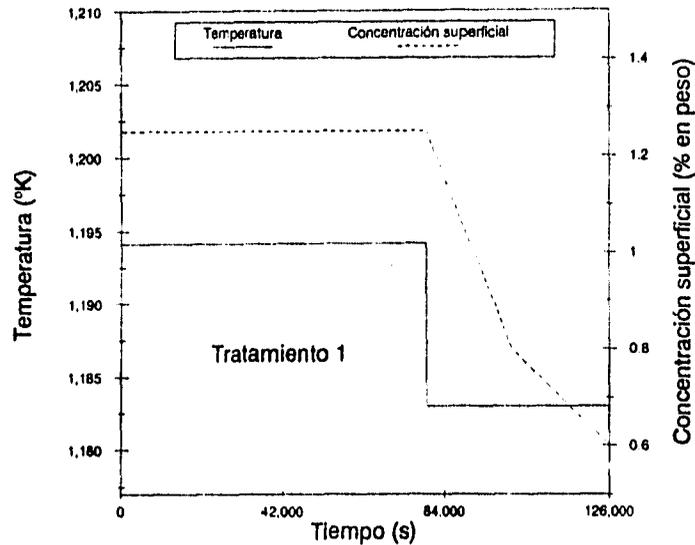


Figura 3.4: Condiciones de operación durante el Tratamiento I

El procedimiento para desarrollar las ecuaciones de las rectas que describen los tratamientos es el siguiente:

- Amplificación de los gráficos.
- Elección en ellos, de los puntos de temperatura y concentración superficial necesarios para obtener las ecuaciones.
- Lectura de las coordenadas de cada punto sobre las escalas mostradas en las gráficas.
- Desarrollo de las ecuaciones en base a los puntos determinados.
- Determinación del intervalo de tiempo en el que es válida cada ecuación.

Las ecuaciones (ver Apéndice C) con sus respectivas condicionales de tiempo, se incluyeron en el programa principal. De esta manera, cada vez que se avanza un paso de tiempo, se

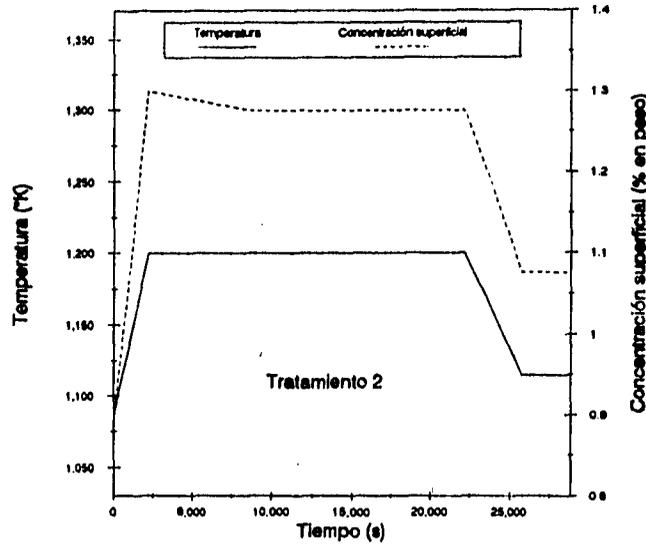


Figura 3.5: Condiciones de operación durante el Tratamiento II

actualizan las condiciones de concentración superficial y temperatura que deben tomarse para realizar los cálculos del coeficiente de difusión y los perfiles de concentración.

Es importante señalar que los tiempos de cálculo están restringidos por el tiempo total de tratamiento. No se puede calcular un perfil de concentración a un tiempo mayor que el tiempo total de tratamiento a menos que se conozcan las condiciones de operación y se introduzcan al listado del programa. Lo anterior obliga a que exista un programa por cada tratamiento que se desee simular.

La validación del modelo se realizó haciendo uso de datos experimentales reportados en las fuentes bibliográficas [11]. Para obtener estos datos, se realizó un procedimiento similar al descrito en la determinación de las ecuaciones que describen la variaciones de temperatura y concentración superficial de los tratamientos.

Nuevamente es necesario el uso del programa INTERPOLACION, ya que las distancias

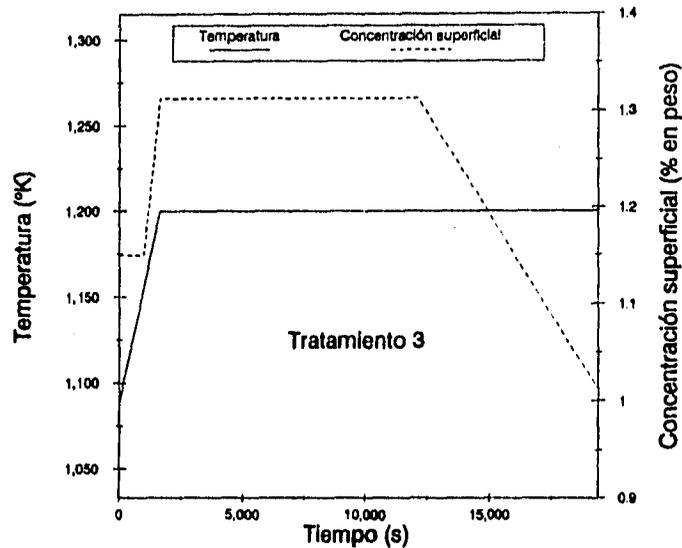


Figura 3.6: Condiciones de operación durante el Tratamiento III

de penetración en las que fué determinada experimentalmente la concentración de carbono, no corresponden con las distancias en las que la concentración fué evaluada por el modelo. De hecho, el número de sitios en los que se evalúa la concentración con el modelo, excede el número de sitios en los cuales se conoce el valor experimental. Por lo tanto, se recurrió al programa para interpolar con el propósito de obtener los valores de concentración predichos por los modelos en las posiciones exactas donde se realizaron las mediciones experimentales. Posteriormente con el programa NORMA se evalúa el error generado por cada método usando los datos experimentales como parámetro comparativo.

Aún cuando los métodos DFI y CN no requieren el uso de un criterio de estabilidad, se uso el mismo intervalo de tiempo que DFE con el fin de poder establecer una comparación entre los métodos.

Los programas se corrieron con la siguiente información: número de nodos espaciales: 100. Distancias de penetración: 0.0036, 0.0022 y 0.0018 m, para Tratamiento I, II y III, respectivamente. Contenidos de carbono iniciales: 0.15, 0.15 y 0.2 % en peso, respectivamente. La temperatura de tratamiento, el contenido superficial de carbono y el coeficiente de difusión son una función del tiempo ⁸.

Se elaboraron en total 14 programas, 3 para la validación de los métodos numéricos, 9 para la simulación de los tratamientos de carburización, uno para interpolar y uno para calcular la norma euclidiana.

⁸Las ecuaciones correspondientes se anexan en el Apéndice C

Capítulo 4

Resultados y Análisis de resultados

Aplicando la metodología del análisis de los procesos [6]-[10], se realizaron pruebas con el fin de validar los métodos de solución. Posteriormente, se validaron los modelos usando datos experimentales reportados en la literatura [11].

4.1 Validación de las técnicas numéricas

4.1.1 Intervalo de tiempo y espaciado internodal

El intervalo de tiempo más restrictivo se obtuvo con 1000 nodos. Sin embargo, se realizaron las pruebas correspondientes al espaciado internodal para la elección final de éste parámetro ya que, como se mencionó anteriormente depende de la finura de la malla colocada en el sistema. Inicialmente se utilizó el Δt obtenido para 1000 nodos espaciales en todas las corridas. La Figura 4.7 muestra los resultados de manera gráfica, las condiciones de corrida se enlistan en la sección 3.4.1.1 en la página 27.

En la Figura 4.7 se observa que los perfiles de concentración predichos por el programa EXPLICIT¹, para cada número de nodos, se traslapan con la solución analítica. Prácticamente es imposible distinguir cada uno de los perfiles, independientemente del número de nodos que represente.

Además de la comparación gráfica cualitativa, es importante también contar con una comparación numérica entre los valores predichos por los métodos y la solución analítica. Esta información numérica dará una idea cuantitativa de cuánto se desvían los valores de concentración de carbono predichos por los métodos numéricos de los valores esperados según la solución

¹ Este programa simula el tratamiento de carburización más sencillo descrito en el capítulo anterior: difusividad y concentración superficial constantes, haciendo uso del método DFE.

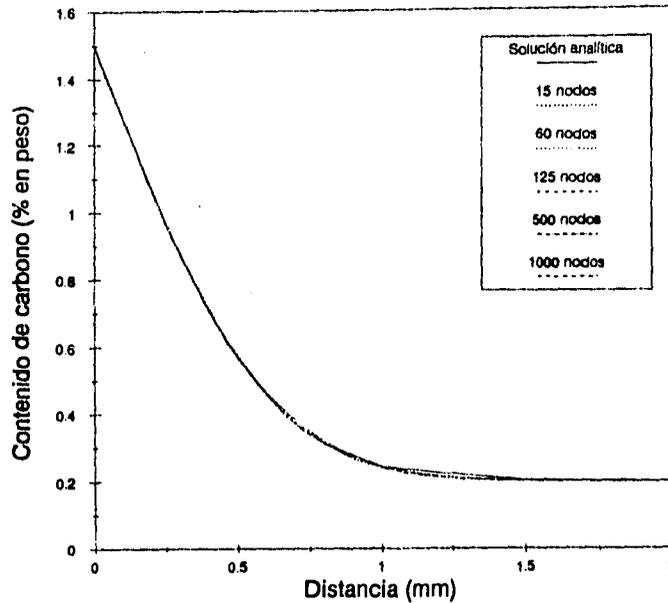


Figura 4.7: Comparación de la solución analítica con soluciones numéricas para diferentes números de nodos espaciales obtenidas con el método DFE.

analítica. La Tabla 4.1 muestra la información generada por el programa INTERPOLACION a partir de los datos predichos por el programa EXPLICIT. INTERPOLACION lee el perfil generado por EXPLICIT y evalúa el contenido de carbono exactamente en las posiciones en donde fué evaluada la solución analítica, de esta manera ya es posible realizar la comparación. Estos datos son la base para la posterior evaluación del error.

En la Tabla 4.1 se observa que a partir de 60 nodos la aproximación numérica se acerca más a la solución analítica. Para las corridas usando 125, 500 y 1000 nodos espaciales, se obtienen valores de concentración muy cercanos a los predichos analíticamente en más de una ocasión. En general, la desviación de los valores obtenidos con estos números de nodos es de 10^{-1} . Por esta razón, es posible proponer que un número de nodos igual a 100 es suficiente para obtener resultados considerablemente buenos, es decir, lograr que la solución numérica sea muy próxima a la solución analítica. Cuando el tiempo requerido para la obtención de resultados

Distancia (mm)	Solución analítica	Número de nodos espaciales				
		15	60	125	500	1000
0.1	1.2785	1.2797	1.2791	1.2789	1.278	1.2783
0.2	1.067	1.071	1.066	1.067	1.066	1.066
0.3	0.8742	0.8759	0.8741	0.8735	0.8749	0.8736
0.4	0.7063	0.7109	0.7067	0.7059	0.7065	0.7056
0.5	0.5666	0.5744	0.5666	0.5666	0.5666	0.5668
0.6	0.4557	0.4612	0.4559	0.4559	0.4555	0.4561
0.8	0.3108	0.3184	0.3113	0.3106	0.3109	0.3108
1.0	0.2409	0.2439	0.2411	0.2408	0.2408	0.2408
1.5	0.2016	0.2025	0.2016	0.2016	0.2016	0.2016

Tabla 4.1: Comparación de los perfiles de concentración calculadas con DFE a diferente espaciamiento internodal con la solución analítica

sea limitado, no se deberá aumentar indiscriminadamente el número de nodos ya que aumenta el tiempo de cálculo empleado por la computadora.

Las observaciones anteriores relativas a la Tabla 4.1 pueden explicarse a partir del significado de una diferencia finita. Como se vió en la revisión bibliográfica, una diferencia finita es la representación algebraica de una derivada.

La definición de derivada es:

$$\frac{dy}{dx} \Big|_x = \lim_{\Delta x \rightarrow 0} \frac{y \Big|_{x+\Delta x} - y \Big|_x}{\Delta x} \quad (4.38)$$

representación de la derivada en diferencias finitas:

$$\frac{dy}{dx} \Big|_x \approx \frac{y \Big|_{x+\Delta x} - y \Big|_x}{\Delta x} \quad (4.39)$$

Estas expresiones indican claramente que la diferencia finita se aproximará más a la derivada si Δx tiende a cero, es decir, si el espaciamiento entre los nodos se hace más pequeño (o Δt en el caso de que la diferencia sea con respecto al tiempo). Por lo tanto, si se aumenta el número de nodos espaciales o temporales en el sistema bajo estudio, la diferencia finita tenderá a representar más fielmente a la derivada y los resultados obtenidos deberán ser más aproximados

con la solución exacta de dicha diferencial.

En la Tabla 4.2 se presentan los valores de las normas euclidianas evaluadas con el programa NORMA para cada número de nodos.

Número de nodos	Norma
15	4.71 E-3
60	4.54 E-4
125	3.16 E-4
500	4.52 E-4
1000	4.80 E-4

Tabla 4.2: Comparación de las normas euclidianas de las diferencias de concentración respecto a la solución analítica obtenidas a distintos espaciamentos internodales

En la Tabla 4.2 se observa que a partir de 60 nodos la magnitud del error no varía significativamente. Estos resultados respaldan las afirmaciones realizadas a partir de la Tabla 4.1, consecuentemente, la discusión relativa a el por qué de los resultados obtenidos en esta Tabla, es aplicable a lo observado en la Tabla 4.2.

Así, el valor de 100 nodos considerado como óptimo se utilizó posteriormente para realizar las pruebas de los modelos. Una vez determinado el espaciamento internodal, debe recalcularse el intervalo de tiempo correspondiente que cumpla con el criterio de estabilidad del método DFE. Ambos valores se usan como entrada en los programas que simulan tratamientos de carburización cuya solución analítica no es directa.

4.1.2 Comparación entre métodos

La Tabla 4.3 muestra las normas euclidianas obtenidas al comparar las concentraciones predichas por cada uno de los métodos con la solución analítica del problema simple descrito en la sección 3.2.2 página 18.

Como puede apreciarse en la Tabla 4.3, los tres métodos proporcionan prácticamente las mismas normas, en un rango de 4.5×10^{-4} . Esto puede explicarse si consideramos que los programas se corrieron con las mismas condiciones de operación. La única diferencia entre los

Método	Fundamento	Norma Euclidiana
Explicito	Evaluación de propiedad futura en base a sustitución de propiedad presente para cada paso de tiempo	4.52 E-4
Implícito	Evaluación de propiedad futura en base a la resolución de una matriz para cada paso de tiempo	4.522 E-4
Crank-Nicolson	Evaluación de propiedad futura en base a la resolución de una matriz construida con el valor de la propiedad pasada por cada paso de tiempo	4.522 E-4

Tabla 4.3: Comparación de las normas euclidianas de las diferencias de concentración respecto a la solución analítica

métodos, es que DFE necesita cumplir con un criterio de estabilidad que restrinja la magnitud del intervalo de tiempo. Por lo que si se selecciona un valor de Δt que cumpla este criterio, el método será igualmente bueno que DFI y CN. En realidad, la única característica de DFE que puede considerarse como una desventaja con respecto a los otros métodos es el hecho de no poder elegir arbitrariamente el intervalo de tiempo para realizar los cálculos.

Los resultados de la Tabla 4.3, muestran que el método DFE presenta una pequeña variación con respecto a los otros métodos haciéndolo parecer el menos exacto. Sin embargo, considerando el orden de magnitud de los errores y de la desviación, esta diferencia puede calificarse como despreciable.

4.2 Validación del modelo

Es importante mencionar la dificultad inherente a la elaboración de un modelo que incorpore condiciones a la frontera que son una función del tiempo. Este problema requiere incuestionablemente de la aplicación de métodos aproximados de solución [4] [1]. En particular, aquí se aprecia la versatilidad que los métodos de diferencias finitas aportan en este sentido. También puede apreciarse que la flexibilidad de estas técnicas son un fundamento sólido para

posteriores modificaciones que permitan incluir propiedades como función de la concentración y la temperatura, por ejemplo.

Como se recordará, los datos experimentales utilizados consisten de tres tratamientos de carburización que no se realizan a temperatura constante; por lo que el coeficiente de difusión empleado está en función de la temperatura en los modelos para tomar en cuenta esta complicación.

Los programas se corrieron con la siguiente información: número de nodos espaciales: 100. Distancias de penetración: 0.0036, 0.0022 y 0.0018 m, para Tratamiento I, II y III, respectivamente. Contenidos de carbono iniciales: 0.15, 0.15 y 0.2 % en peso, respectivamente. La temperatura de tratamiento, el contenido superficial de carbono y el coeficiente de difusión son una función del tiempo ².

La Figura 4.8, muestra los perfiles de concentración calculados por los tres métodos comparados con los datos experimentales obtenidos a partir del Tratamiento I descrito en la Figura 3.4 de la página 30. Similarmente, las Figuras 4.9 y 4.10 se construyen para el Tratamiento II y III, Figs. 3.5 y 3.6 en las páginas 31 y 32, respectivamente.

El análisis de las Figuras 4.8, 4.9 y 4.10 muestra que los perfiles de concentración de carbono determinados con cada uno de los métodos propuestos, son prácticamente iguales entre sí. Este comportamiento permanece inalterable en cada uno de los tratamientos simulados según se puede observar en estas mismas Figuras.

En cuanto a la aproximación de los perfiles obtenidos numericamente con los perfiles experimentales se puede anotar que: la forma del perfil experimental coincide con la forma del perfil numérico. Además, estas gráficas muestran que las curvas numéricas se aproximan con las experimentales y en algunas partes llegan a coincidir totalmente. Sin embargo, con objeto de establecer una comparación más cuantitativa y por lo tanto más objetiva, se construye la Tabla 4.4, en base a la norma euclidiana de las diferencias de concentración predicha y experimental.

En la Tabla 4.4 se muestran los valores de las normas generadas por cada método y cada

²Las ecuaciones correspondientes se anexan en el Apéndice C

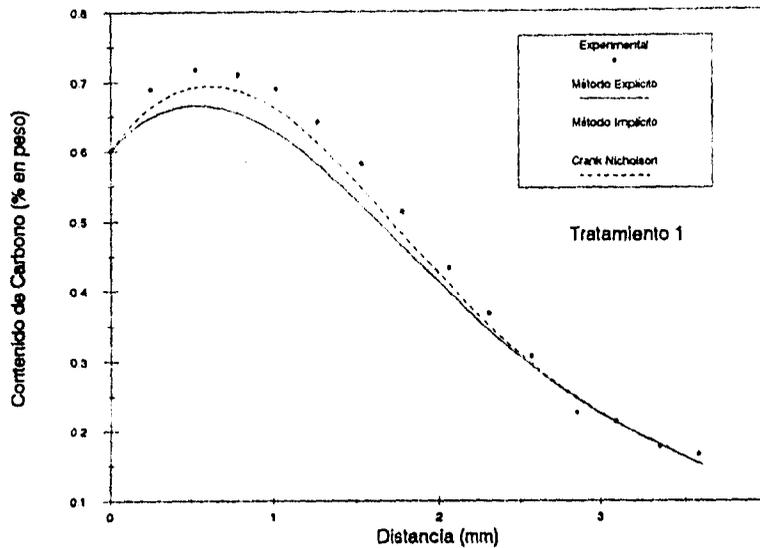


Figura 4.8: Comparación entre los perfiles predichos por cada uno de los métodos empleados en la simulación y el perfil experimental para el Tratamiento I

tratamiento correspondientes a los perfiles mostrados en las Figuras 4.8, 4.9 y 4.10. Como se aprecia en esta Tabla, en el caso del primer tratamiento, los métodos más aproximados son DFI y CN.

Aún cuando podría considerarse que cualquiera de los métodos proporciona igual confiabilidad de resultados, el hecho de que el método DFE utilice solamente los valores de concentración en un tiempo anterior para evaluar el valor correspondiente al tiempo presente, sin considerar que ya cambiaron las condiciones en los alrededores del nodo en ese instante de tiempo, puede llegar a causar una desviación de la realidad más significativa que cualquiera de los otros dos métodos. Tanto DFI como CN consideran que existe un cambio en la concentración de todos los nodos con cada paso de tiempo, y evalúan el nuevo perfil bajo esta premisa, el método DFE no lo considera.

En base a lo expuesto anteriormente, es probable que los valores predichos por DFE sean

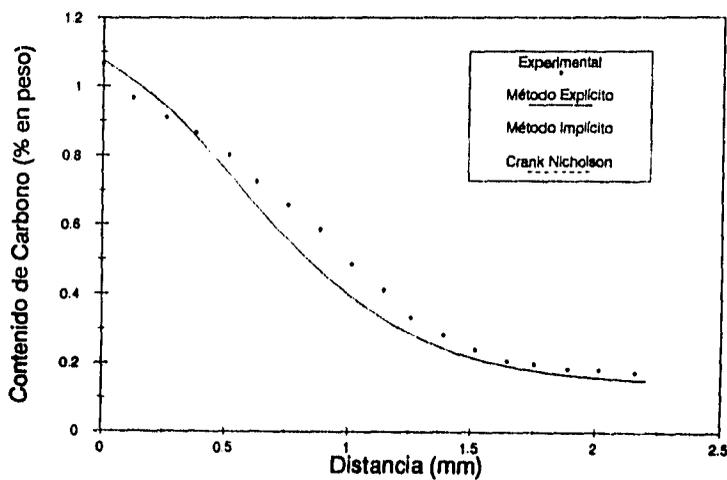


Figura 4.9: Comparación entre los perfiles predichos por cada uno de los métodos empleados en la simulación y el perfil experimental para el Tratamiento II

menos aproximados que los predichos con las otras técnicas numéricas estudiadas. Sin embargo, se observa que en los dos tratamientos restantes, las magnitudes de las normas para cada método difieren en algunas cifras sin alcanzar un orden de magnitud. Esto resulta aparentemente contradictorio con lo ya discutido. Sin embargo, si se considera que el tiempo de tratamiento en I, es extremadamente grande comparado con II y III, es posible suponer que la variación apreciada en el tratamiento I es un efecto acumulativo. Esto es, DFE no considera los cambios de concentración en el tiempo de las fronteras de un nodo i , esta omisión genera un pequeño error que posiblemente crece conforme aumenta el tiempo de cálculo. Probablemente por esta razón, solo es apreciable la diferencia a tiempos grandes de tratamiento sin afectar la tendencia general de los perfiles una vez graficados. Esto representa una desventaja para DFE comparándolo con DFI y CN.

Un análisis basado en normas euclidianas, permite distinguir cuantitativamente, diferencias que normalmente no son perceptibles cuando se realizan comparaciones en base a gráficas. Una comparación gráfica, si bien deja ver que los resultados obtenidos con los diferentes métodos son prácticamente iguales, al mismo tiempo dificulta la observación de las pequeñas diferencias que en ocasiones pueden ser importantes (veáanse las Figuras 4.8 a 4.10).

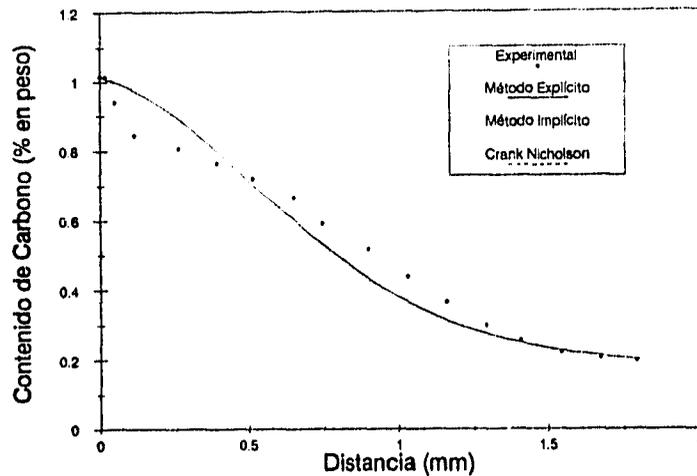


Figura 4.10: Comparación entre los perfiles predichos por cada uno de los métodos empleados en la simulación y el perfil experimental para el Tratamiento III

4.3 Análisis general de resultados

La gran concordancia entre las predicciones hechas en base a estos simuladores numéricos y la solución analítica se puede explicar en base a que los métodos numéricos empleados son convergentes y estables. Esto se comprueba cuando se observa que la solución obtenida numéricamente tiende a ser la generada por métodos analíticos conforme se refina la discretización espacial y temporal del sistema. Esto puede ser importante porque la mayoría de los problemas de interés práctico presentan características que impiden la obtención directa de soluciones analíticas. No obstante que la implementación de cada uno de los métodos en un programa de cómputo es una tarea compleja, ésto se ha logrado.

El método DFE es más sencillo de implementar que cualquiera de los otros dos. El álgebra empleada en el desarrollo de las ecuaciones de balance es más 'complicada' para DF1 y CN

Tratamiento	Método	Norma
I	DFE	5.867E-04
I	DFI	5.966E-05
I	CN	5.966E-05
II	DFE	3.588E-03
II	DFI	3.59E-03
II	CN	3.59E-03
III	DFE	2.644E-03
III	DFI	2.646E-03
III	CN	2.646E-03

Tabla 4.4: Comparación de las normas euclidianas de las diferencias de concentración respecto a los valores experimentales para los tres tratamientos

que para DFE. De hecho, para encontrar la solución con DFI y CN es necesario el uso de un método paralelo que resuelva la matriz tridiagonal resultante. Desde este punto de vista y tomando en cuenta los resultados, es mucho más sencillo construir un modelo de la carburización como los aquí presentados usando el método DFE. A fin de cuentas, esto no representa ningún inconveniente puesto que los resultados parecen altamente confiables.

En cuanto a la comparación de los datos predichos por los simuladores con los valores experimentales por medio de las normas, se puede notar que las pequeñísimas variaciones observadas favorecen al método DFE. Sin embargo, considerando los ordenes de magnitud de las normas obtenidas, cualquiera de los tres métodos proporciona la misma confiabilidad de resultados. Por otra parte, es preciso recordar que el método DFE posee una simplicidad computacional que facilita su implementación como un primer paso para ganar familiaridad con estas técnicas, sin olvidar que los métodos DFI y CN carecen de restricciones respecto a su estabilidad.

Capítulo 5

Conclusiones

A continuación se enlistan las conclusiones más relevantes obtenidas en este trabajo:

- Es posible modelar el proceso de carburización usando la metodología del análisis de procesos propuesto en la literatura.
- Ante la dificultad de la obtención de una solución analítica, los modelos numéricos son útiles en la simulación de procesos reales para los que las condiciones a la frontera son dependientes del tiempo, por ejemplo.
- No solo es posible, sino también conveniente, modelar mediante técnicas numéricas el transporte de carbono en un acero cuando es sometido a un tratamiento de carburización con gas aún cuando:
 - Los coeficientes de difusión dependan de la composición y la temperatura.
 - La difusión ocurra bajo condiciones no isotérmicas.
 - El potencial de carbono en la atmósfera carburizante sea función del tiempo.
- La aproximación de los métodos puede controlarse, y eventualmente mejorarse, seleccionando de manera adecuada el espaciamiento internodal.
- En cuanto a la comparación entre métodos se puede concluir lo siguiente:
 - El método DFE es el más sencillo de implementar a un programa de cómputo.
 - Los métodos DF1 y CN presentan un mayor grado de dificultad al ser implementados a un programa, pero tienen la gran ventaja de carecer de restricciones respecto a su estabilidad.

Bibliografia

- [1] D. W. McCurdy *Software simulation of atmosphere carburizing and hardening Carburizing processing and performance. Conference proceedings ASM, USA 1989.*
- [2] B. S. Bokshtein *Diffusion in metals* Ed. MIR, Mosc 1980.
- [3] W. Reubges *Plasma(ion) carburizing: Equipment and applications Carburizing processing and performance. Conference proceedings ASM, USA 1989.*
- [4] C. A. Stickels, C. M. Mack *Overview of carburizing processes and modeling Carburizing processing and performance. Conference proceedings ASM, USA 1989*
- [5] D. A. Anderson; J. C. Tannehill and R. H. Pletcher *Computational Fluid Mechanics and Heat Transfer.* Hemisphere Pub. Co. Cambridge. 1984
- [6] Szekely, J.; Evans, J.W. and Brimacombe, J.K. *The Mathematical and Physical Modeling of Primary Metals Processing Operations.* Wiley Interscience. 1988.
- [7] N. Themelis. *Techniques of Process Analysis in Extractive Metallurgy Metallurgical Transactions* Aug. 1972. Vol. 3. pag 2021-2029.
- [8] J. K. Brimacombe et. al. *Tools for the Development of Metallurgical Processes Bull. Proc. Australas. Inst. Min. Metall.* jun. 1985. Vol. 290. No. 4. pag. 59-74.
- [9] J. K. Brimacombe *Role of Mathematical Modelling in Metallurgical Engineering International Conference in Metallurgical Research: Fundamentals and Applied Aspects* February 1985. IIT, Kanpur, India. pag 241-268.
- [10] J. Szekely *The Mathematical and Physical Modelling of Metals Processing Operations Metallurgical Treatises.* T.M.S. p 277-289.

- [11] **Metals Handbook** Vol. 2 *Heat treating. Cleaning and finishing* 8va. ed., ASM.
- [12] Verhoeven **Fundamentos de Metalurgia Física** Cap. *Difusión*, Ed. Limusa. 2a ed.
- [13] Lapidus L., **Numerical solution of partial differential equations in science and Engineering**, Ed. John Wiley and Sons. USA 1982, p. 162-168
- [14] Phillips G.M. **Theory and applications of Numerical Analysis** Academic Press, Great Britain 1973. p 229
- [15] Ames F. W. **Numerical Methods for Partial Differential Equations** Academic Press, 3a. ed., USA 1992. p 35, 52, 58-63, 71, 162

Capítulo 6

Apéndices

Apéndice A

Ecuaciones de diferencias finitas para nodos centrales

Ecuación para el nodo central usando DFE

$$- D A \frac{(C_i^t - C_{i-1}^t)}{\Delta X} - D A \frac{(C_i^t - C_{i+1}^t)}{\Delta X} = A \Delta X \frac{(C_i^{t+1} - C_i^t)}{\Delta t} \quad (\text{A.40})$$

Multiplcando todo por el espaciamento internodal y dividiendo entre la difusividad se obtiene:

$$- C_i^t + C_{i-1}^t - C_i^t + C_{i+1}^t = \frac{\Delta X^2}{D \Delta t} (C_i^{t+1} - C_i^t) \quad (\text{A.41})$$

donde

$$\Delta F_0 = \frac{D \Delta t}{\Delta X^2} \quad (\text{A.42})$$

entonces:

$$- 2 \Delta F_0 C_i^t + \Delta F_0 (C_{i-1}^t + C_{i+1}^t) + C_i^t = C_i^{t+1} \quad (\text{A.43})$$

finalmente:

$$C_i^{t+1} = C_i^t (1 - 2 \Delta F_0) + \Delta F_0 (C_{i-1}^t + C_{i+1}^t) \quad (\text{A.44})$$

Ecuación para el nodo central usando DFI

$$- D A \frac{(C_i^{t+1} - C_{i-1}^{t+1})}{\Delta X} - D A \frac{(C_i^{t+1} - C_{i+1}^{t+1})}{\Delta X} = A \Delta X \frac{(C_i^{t+1} - C_i^t)}{\Delta t} \quad (\text{A.45})$$

de manera similar al desarrollo anterior se obtiene:

$$- C_i^{t+1} + C_{i-1}^{t+1} - C_i^{t+1} + C_{i+1}^{t+1} = \frac{\Delta X^2}{D \Delta t} (C_i^{t+1} - C_i^t) \quad (\text{A.46})$$

areglando términos:

$$- 2 \Delta F_0 C_i^{t+1} + \Delta F_0 (C_{i-1}^{t+1} + C_{i+1}^{t+1}) - C_i^{t+1} = - C_i^t \quad (\text{A.47})$$

finalmente se obtiene:

$$C_i^{t+1} (1 + 2 \Delta F_o) - \Delta F_o (C_{i-1}^{t+1} + C_{i+1}^{t+1}) = C_i^t \quad (\text{A.48})$$

Para el método Crank Nicholson basta con multiplicar por un medio la ecuación final obtenida con el método explícito y la obtenida con el método implícito, los productos resultantes deben sumarse para obtener la ecuación con CN.

$$\frac{1}{2} (C_i^{t+1} = C_i^t (1 - 2 \Delta F_o) + \Delta F_o (C_{i-1}^t + C_{i+1}^t)) \quad (\text{A.49})$$

$$\frac{1}{2} (C_i^{t+1} (1 + 2 \Delta F_o) - \Delta F_o (C_{i-1}^{t+1} + C_{i+1}^{t+1}) = C_i^t) \quad (\text{A.50})$$

La ecuación final es:

$$C_i^{t+1} (1 + \Delta F_o) - \frac{\Delta F_o}{2} (C_{i-1}^{t+1} + C_{i+1}^{t+1}) = C_i^t (1 - \Delta F_o) + \frac{\Delta F_o}{2} (C_{i-1}^t + C_{i+1}^t) \quad (\text{A.51})$$

Apéndice B

Listados de los programas

DFE

```
PROGRAM METODO_EXPLICITO;
USES CRT,dos;
TYPE
LETRA=ARRAY[0..1000] OF REAL;
CONST
L=0.2;CS=1.5;CINC=0.2;TEMP=1273;
VAR
JO, I, N, Q, J, F, P:INTEGER;
CP, CF, COE, FO, PT, POS:LETRA;
DELTAT, DT, DX, TFIN, T, CI:REAL;
D, DELTATH, B:REAL;
hora, minuto, segundo, centesima:word;
D, S:CHAR;
PROCEDURE PRESENTACION;
BEGIN
WINDOW(1,1,80,25);TEXTBACKGROUND(BLACK);CLRSCR;WINDOW(20,16,75,23);
TEXTBACKGROUND(YELLOW);CLRSCR;WRITELN;TEXTCOLOR(CYAN);
WRITELN(' Departamento de Ingenier'\{i}a Qu'\{i}mica Metal'\{u}rgica');
WRITELN(' Facultad de Qu'\{i}mica UNAM ');
WRITELN(' Simulaci'\{o}n del Proceso de Difusi'\{o}n en un s'\{o}lido');
WRITELN(' Carburizaci'\{o}n en una sola fase');
WRITELN(' Blanca E. Torres C. ');
WRITELN(' Diferencias Finitas Expl'\{i}cito');
Delay(4000)
```

```

WINDOW(1,1,80,25);TEXTBACKGROUND(BLACK);CLRSCR;
END;
PROCEDURE SUPOSICIONES;
BEGIN
WINDDW(1,1,80,25);TEXTBACKGROUND(BLACK);CLRSCR;WINDOW(16,8,66,18);
TEXTBACKGROUND(YELLOW);CLRSCR;WRITELN;TEXTCOLOR(CYAN);
WRITELN('          Suposiciones:');WRITELN;
WRITELN(' * Sistema Microsc\{o}pico ');
WRITELN(' * Flujo Unidireccional');
WRITELN(' * Estado Inestable');
WRITELN(' * Condiciones Isot\{e}rmicas');
WRITELN(' * Concentraci\{o}n de C constante en la superficie');
WRITELN(' * Coeficiente de difusi\{o}n constante');
Delay(5000);
WINDOW(1,1,80,25);TEXTBACKGROUND(BLACK);CLRSCR;
END;
PROCEDURE LECTURADEDATOS;
BEGIN
CLRSCR;
CP[0]:=CS;
WINDOW(1,1,0,25);TEXTBACKGROUND(BLACK);CLRSCR;WINDOW(28,13,60,13);
TEXTBACKGROUND(CYAN);CLRSCR;WRITELN;
TEXTCOLOR(BLUE);WRITE(' NUMERO DE MODOS : ');
READLN(N);
WINDOW(1,1,80,2);TEXTBACKGROUND(BLACK);CLRSCR;
DX:=L/(N-1);
POS[0]:=0;
FOR I:=1 TO N-1 DO
POS[I]:=I*DX*10;
END;
PROCEDURE CALCULOCONC;
BEGIN
CF[0]:=CS;
FOR I:=1 TO N-2 DO

```

```

CF[I]:=-CP[I]*COE[I]+FO[I]*(CP[I]+CP[I+1]);
CF[N-1]:=CINC;
END;
PROCEDURE CRITERIODEESTABILIDAD;
BEGIN
CLRSCR;
DELTAT:=(DX*DX)/(2*D);
DELTATH:=DELTAT/60;
TEXTCOLOR(CYAN);
GOTOXY(10,5);WRITELN('EL INTERVALO DE TIEMPO DEBE SER MENOR A:
',DELTAT:5:5,' s ');
GOTDXY(30,10);WRITE('DT ? : ')
READLN(DT);
WHILE DT>DELTAT DO
BEGIN
WRITELN('ABSTENGASE DE SUMINISTRAR VALORES MAYORES A ',DELTAT:5:5);
WRITE('SUMINISTRE OTRO VALOR : ');
READLN(DT);
END;
PROCEDURE CALCULDFDURIER;
BEGIN
FOR I:=1 TO N-1 DO
BEGIN
FO[I]:=(D*DT)/(DX*DX);
COE[I]:=1-(2*FO[I]);
END;END;
PROCEDURE TIEMPODEIMPRESION;
BEGIN
WINDOW(1,1,8,25);TEXTBACKGROUND(BLACK);CLRSCR;WINDOW(15,13,60,13);
TEXTBACKGROUND(CYAN);CLRSCR;WRITELN;
TEXTCOLOR(BLUE);WRITE(' CUANTOS TIEMPOS SE IMPRIMIRA EL PERFIL : ');
READLN(Q);
WRITE('          CUALES SON ESTOS TIEMPOS ( s ) : ');
WINDOW(65,13,72,13);TEXTBACKGROUND(CYAN);CLRSCR;WRITELN;TEXTCOLOR(BLUE);

```

```

FOR J:=1 TO Q DO
READLN(PT[J]);
TFIN:=PT[Q];
WINDOW(1,1,80,25);TEXTBACKGROUND(BLACK);CLRSCR;
END;
PROCEDURE ASIGNACION;
BEGIN
CP[0]:=CS;
FOR I:=1 TO N-1 DO
CP[I]:=CF[I];
CP[N-1]:=CINC;
END;
PROCEDURE GRABAR;
VAR NOMBRE: STRING[14];
F1:TEXT;
BEGIN
NOMBRE:='A:EXPLICIT.MOD';
ASSIGN(F1,NOMBRE);
APPEND(F1);
WRITELN(F1);
WRITELN(F1);
WRITELN(F1,' Tiempo al cual se calcula el perfil : ',T:8:5);
GetTime(hora,minuto,segundo,centesima);
WRITELN(F1,' SON LAS ',hora,':',minuto,':',segundo,':',centesima);
WRITELN(F1,' POSICION      % EN PESO DE C ');
FOR I:=0 TO N-1 DO
WRITELN(F1,' ',POS[I]:3:3,' ',CF[I]:10:10);
CLOSE(F1);
END;
BEGIN
CLRSCR;
PRESENTACION;
SUPOSICIONES;
LECTURADEDATOS;

```

```
CP[0]:=CS;
FOR I:=1 TO N-1 DO
  CP[I]:=CINC
D:=0.0000003;
CRITERIODEESTABILIDAD;
TIEMPODEIMPRESION;
GOTOXY(50,20);TEXTBACKGROUND(CYAN);TEXTCOLOR(RED);
WRITELN('Procesando. No interrumpir ');
J:=1;
T:=0;
T:=T+DT;
TEXTBACKGROUND(BLACK); TEXTCOLOR(WHITE)
WHILE T<=TFIN DO
  BEGIN
    CALCULOFOURIER;
    CALCULOCONC;
    FOR J:=1 TO Q DO
      BEGIN
        IF ((T-(DT/2))<=PT[J]) AND (PT[J]<=(T+(DT/2))) THEN
          BEGIN
            WRITELN;WRITELN;
            WRITELN(' TIEMPO : ',T:8:5);
            WRITELN(' POSICION      % EN PESO DE C ');
            FOR I:=0 TO N-2 DO
              WRITELN(' ', POS[I]:10:10,' ',CF[I]:5:10);
            END;
            END;
            ASIGNACION;
            T:=T+DT;
            JO:=JO+1;
            GOTOXY(65,22);WRITE(JO);END;END.
```

DFI

```

PROGRAM IMPLICITO;
USES CRT,dos;
CONST
L=0.2;CS=1.5;CINC=0.2;TEMP=1273;
VAR
A, B, C, D, V, FO, CP, CF, PT, POS, BETA, GAMMA:ARRAY[0..800] OF REAL;
T, DX, DT, TFIN, DIF:REAL;
I, J, Q, N, K, DM:INTEGER;
O:CHAR;
hora,minuto,segundo,centesima:word;
PROCEDURE PRESENTACION;
BEGIN
WINDOW(1,1,80,25);TEXTBACKGROUND(BLACK);CLRSCR;WINDOW(20,16,75,23);
TEXTBACKGROUND(YELLOW);CLRSCR;WRITELN;TEXTCOLOR(CYAN);
GOTOXY(25,23);WRITELN(' Diferencias Finitas Impl\{'i}cito');
Delay(400);
WINDOW(1,1,80,25);TEXTBACKGROUND(BLACK);CLRSCR;
END;
PROCEDURE LECTURADEDATOS;
BEGIN
CLRSCR;
CP[1]:=CS;
WINDOW(1,1,80,25);TEXTBACKGROUND(BLACK);CLRSCR;WINDOW(28,13,60,13);
TEXTBACKGROUND(CYAN);CLRSCR;WRITELN;TEXTCOLOR(BLUE);
WRITE(' NUMERO DE NODOS : ');
READLN(N);
WINDOW(1,1,80,25);TEXTBACKGROUND(BLACK);CLRSCR;
DX:=-L/(N-1);
POS[1]:=0;
FOR I:=2 TO N DO
POS[I]:=(I-1)*DX*10;
END;

```

```

PROCEDURE TIEMPODEIMPRESION;
BEGIN
WINDOW(1,1,80,25);TEXTBACKGROUND(BLACK);CLRSCR;WINDOW(15,13,60,13);
TEXTBACKGROUND(CYAN);CLRSCR;WRITELN;TEXTCOLOR(BLUE);
WRITE(' CUANTOS TIEMPOS SE IMPRIMIRA EL PERFIL ? ');
READLN(Q);
WRITE(' CUALES SON ESTOS TIEMPOS ( s ) : ');
WINDOW(65,13,72,13);TEXTBACKGROUND(CYAN);CLRSCR;WRITELN;TEXTCOLOR(BLUE);
FOR J:=1 TO Q DO
READLN(PT[J]);
TFIN:=PT[Q];
WINDOW(1,1,80,25);TEXTBACKGROUND(BLACK);CLRSCR;
PROCEDURE DELT;
BEGIN
WINDOW(1,1,80,25);TEXTBACKGROUND(BLACK);CLRSCR;WINDOW(28,13,45,13);
TEXTBACKGROUND(CYAN);CLRSCR;WRITELN;TEXTCOLOR(BLUE);
WRITE(' DT ? : ');
READLN(DT);
WINDOW(1,1,80,25);TEXTBACKGROUND(BLACK);CLRSCR;
WHILE DT<=0 DO
BEGIN
WRITE(' DT : ');
READLN(DT);
END;
PROCEDURE CALCULOFOURIER;
BEGIN
FOR I:=1 TO N DO
FO[I]:=(DIF*DT)/(DX*DX);
END;
PROCEDURE MATRIDDIAG;
BEGIN
V[1]:=CS;
B[1]:=1;
C[1]:=0;

```

```

D[1]:=CP[1];
FOR I:=2 TO N-1 DO
B[I]:=-2-(1/FO[I]);
FOR I:=2 TO N-1 DO
C[I]:=1;
FOR I:=2 TO N-1 DO
A[I]:=1;
FOR I:=2 TO N-1 DO
D[I]:=-(1/FO[I])*CP[I];
B[N]:=1;
A[N]:=0;
D[N]:=CINC;
BETA[1]:=B[1];
GAMMA[1]:=D[1]/BETA[1];
FOR I:=1 TO N-1 DO
BEGIN
BETA[I]:=B[I]-((A[I]*C[I-1])/BETA[I-1]);
GAMMA[I]:=-(D[I]-A[I]*GAMMA[I-1])/BETA[I];
END;
V[N]:=GAMMA[N];
FOR K:=1 TO N-2 DO
BEGIN
I:=N-K;
V[I]:=GAMMA[I]-((C[I]*V[I+1])/BETA[I]);
END;
V[N]:=CINC;
END;
PROCEDURE ASIGNACION;
BEGIN
FOR I:=2 TO N DO
CP[I]:=V[I];
PROCEDURE GRABAR;
VAR NOMBRE: STRING[14];
F1:TEXT;

```

```

BEGIN
NOMBRE:='A:IMPLICIT.MOD';
ASSIGN(F1,NOMBRE);
APPEND(F1);
WRITELN(F1);
WRITELN(F1);
WRITELN(F1,' Tiempo al cual se calcula el perfil : ',T:8:5);
GetTime (hora,minuto,segundo,centesima);
WRITELN(F1,' son las ',hora,':',minuto,':',segundo,':',centesima);
WRITELN(F1,' POSICION      % EN PESO DE C ');
FOR I:=1 TO N DO
WRITELN(F1,' ', POS[I]:3:3,' ',V[I]:10:10);
CLOSE(F1);
J:=J+1;
END;
BEGIN
CLRSCR;
PRESENTACION;
SUPOSICIONES;
METODO;
LECTURADEDATOS;
FOR I:=2 TO N DO
CP[I]:=CINC;
DIF:=0.0000003;
DELT;
TIEMPODEIMPRESION;
GOTOXY(50,22);TEXTBACKGROUND(CYAN);TEXTCOLOR(RED)
WRITELN('Procesando. No interrumpir ');
T:=0;
J:=1;
T:=T+DT;
TEXTBACKGROUND(BLACK);TEXTCOLOR(WHITE);
WHILE T<=TFIN DO
BEGIN

```

```
CP[1]:=CS;
CALCULOFOURIER
MATRIDIAG;
IF ((T-DT)<=PT[J]) AND (PT[J]<=(T+DT)) THEN
BEGIN
GRABAR;
WRITELN;WRITELN;
WRITELN(' TIEMPO : ',T:8:5);
WRITELN(' POSICION      % EN PESO DE C ');
FOR I:=1 TO N DO
WRITELN(' ', POS[I]:3:3,' ',V[I]:10:10);
END;
ASIGNACION;
T:=T+DT;
END.
```

CN

```
PROGRAM CRANK_NICHOLSON;
USES CRT,dos;
CONST
L=0.2;CS=1.5;CINC=0.2;TEMP=1273;
VAR
A, B, C, D, V, FO, CP, CF:ARRAY[0..800] OF REAL;
PT, POS, BETA, GAMMA:ARRAY[0..800] OF REAL;
DX, DT, TFIN, DIF:REAL;
I, J, Q, M, K, DM:INTEGER;
O:CHAR;
hora,minuto,segundo,centesima:word;
PROCEDURE PRESENTACION;
BEGIN
WINDOW(1,1,80,25);TEXTBACKGROUND(BLACK);CLRSCR;WINDDW(20,16,75,22);
TEXTBACKGROUND(YELLOW);CLRSCR;WRITELN;TEXTCOLOR(CYAN);
GOTOXY(25,22);WRITELN(' Crank Nicholson ');
Delay(3000)
WINDOW(1,1,80,25);TEXTBACKGROUND(BLACK);CLRSCR;
END;
PROCEDURE LECTURADEDATOS;
BEGIN
CLRSCR;
CP[1]:=CS
WINDOW(1,1,80,25);TEXTBACKGROUND(BLACK);CLRSCR;WINDOW(28,13,50,13);
TEXTBACKGROUND(CYAN);CLRSCR;WRITELN;
TEXTCOLOR(BLUE);
WRITE(' NUMERO DE NODOS : ');
READLN(N);
WINDOW(1,1,80,25);TEXTBACKGROUND(BLACK);CLRSCR;
DX:=-L/(N-1);
DM:=N-2;
POS[1]:=0;
```

```
FOR I:=2 TO N DO
POS[I]:=(I-1)*DX*10;
END;
PROCEDURE TIEMPODEIMPRESION;
BEGIN
WINDOW(1,1,80,25);TEXTBACKGROUND(BLACK);CLRSCR;WINDOW(15,13,60,13);
TEXTBACKGROUND(CYAN);CLRSCR;WRITELN;TEXTCOLOR(BLUE);
WRITE(' CUANTOS TIEMPOS SE IMPRIMIRA EL PERFIL ? ');
READLN(Q);
WRITE(' CUALES SON ESTOS TIEMPOS ( s ) : ');
WINDOW(65,13,72,13);TEXTBACKGROUND(CYAN);WRITELN;TEXTCOLOR(BLUE);
FOR J:=1 TO Q DO
READLN(PT[J]);
TFIN:=PT[Q];
WINDOW(1,1,80,25);TEXTBACKGROUND(BLACK);CLRSCR;
END;
PROCEDURE DELT;
BEGIN
WINDOW(1,1,80,25);TEXTBACKGROUND(BLACK);CLRSCR;WINDOW(28,13,46,13);
TEXTBACKGROUND(CYAN);CLRSCR;WRITELN;TEXTCDLOR(BLUE);
WRITE(' DT ? ');
READLN(DT);
WINDOW(1,1,80,25);TEXTBACKGRDUND(BLACK);CLRSCR;
WHILE DT<=0 DO
BEGIN
WRITE(' DT : ');
READLN(DT);
END;
PRDCEDURE CALCULOFOURIER;
BEGIN
FOR I:=1 TO N DO
FO[I]:=(DIF*DT)/(DX*DX);
END;
PROCEDURE MATRIDIAG;
```

```

BEGIN
V[1]:=CS;
B[1]:=1;
C[1]:=0;
D[1]:=CP[1];
FOR I:=2 TO N-1 DO
B[I]:=-(1/2)-(1/(2*FO[I]));
FOR I:=2 TO N-1 DO
C[I]:=1/2;
FOR I:=2 TO N-1 DO
A[I]:=1/2;
FOR I:=2 TO N-1 DO
D[I]:=CP[I]*((1/2)-FO[I]-(1/(2*FO[I])))+(FO[I]/2)*(CP[I+1]+CP[I-1]);
B[N]:=1;
A[N]:=0;
D[N]:=CINC;
BETA[1]:=B[2];
GAMMA[1]:=D[1]/BETA[1];
FOR I:=2 TO N DO
BEGIN
BETA[I]:=B[I]-((A[I]*C[I-1])/BETA[I-1]);
GAMMA[I]:=(D[I]-(A[I]*GAMMA[I-1]))/BETA[I];
END;
V[N]:=GAMA[N];
FOR K:=1 TO N-2 DO
BEGIN
I:=N-K;
V[I]:=GAMA[I]-((C[I]*V[I+1])/BETA[I]);
END;
V[N]:=CINC;
END;
PROCEDURE ASIGNACION;
BEGIN
FOR I:=2 TO N DO

```

```

CP[I]:=V[I];
END;
PROCEDURE GRABAR;
VAR NOMBRE: STRING[14];
F1:TEXT;
BEGIN
NOMBRE:='A:NICHOL.MOD';
ASSIGN(F1,NOMBRE);
APPEND(F1);
WRITELN(F1);
WRITELN(F1);
WRITELN(F1,' Tiempo al cual se calcula el perfil : ',T:8:5);
GetTime(hora,minuto,segundo,centesima);
WRITELN(F1,' SON LAS ',hora,':',minuto,':',segundo,':',centesima);
WRITELN(F1,' POSICION      % EN PESO DE C ');
FOR I:=1 TO N DO
WRITELN(F1,' ', PDS[I]:3:3,' ',V[I]:10:10);
CLOSE(F1);
J:=J+1;
END;
BEGIN
CLRSCR
PRESENTACION;
SUPOSICIONES;
METODO;
LECTURADEDATOS;
FOR I:=2 TO N DO
CP[I]:=CINC;
DIF:=0.0000003;
DELT;
TIEMPODEIMPRESION;
GOTOXY(60,22);TEXTBACKGROUND(CYAN);TEXTCOLOR(RED);
WRITELN('Procesando. No interrumpir ');
T:=0;

```

```
J:=1;
T:=T+DT;
TEXTBACKGROUND(BLACK);TEXTCOLOR(WHITE);
WHILE T<=TFIN DO
BEGIN
CP[1]:=CS;
CALCULOFOURIER;
MATRIDIAG;
IF ((T-DT)<=PT[J]) AND (PT[J]<=(T+DT)) OR (T=PT[J]) THEN
BEGIN
GRABAR
WRITELN;WRITELN
WRITELN(' TIEMPD : ',T:8:5);
WRITELN(' POSICION      % EN PESO DE C ');
FDR I:=1 TO N DO
WRITELN(' ', PDS[I]:3:3,' ',V[I]:1:1);
END;
ASIGNACION;
T:=T+DT;
END;
END.
```

Tratamiento I DFE

```
PROGRAM METODO_EXPLICITO_TRATAMIENTO_1;
USES CRT, DOS;
TYPE
LETRA=ARRAY[0..200] OF REAL;
VAR
I, N, Q, J, F, P:INTEOER;
CP, CF, COE, FO, PT, POS:LETRA;
D:LETRA;
DELTAT, CS, CINC, OT, L, DX, TFIM CI:REAL;
TEMP, DELTATH, B:REAL;
O, S:CHAR;
hora, minuto, segundo, centesima:WORD;
PROCEDURE LECTURADEDATOS;
BEGIN
CLRSCR;
WRITE('LONGITUD TOTAL DE DIFUSION (cm) : ');
READLN(L);
WRITE('CONCENTRACION DE CARBON INICIAL ( % wt ) : ');
READLN(CINC);
WRITELN('NUMERO DE MODOS : ');
READLN(N);
DX:=L/(N-1)
POS[0]:=0;
FOR I:=1 TO N-1 DO
POS[I]:=I*DX*10;
END;
PROCEDURE COEFICIENTEDEDIFUSION;
BEGIN
FOR I:=1 TO N DO
D[I]:=exp(-32000/(1.987*TEMP))*(0.07+(0.06*CP[I]));
END;
PRDCEDURE CALCULOCONC;
```

```
BEGIN
CF[0]=CS;
FOR I:=1 TO N-2 DO
CF[I]=CP[I]*COE[I]+FO[I]*(CP[I-1]+CP[I+1]);
CF[N-1]=CINC;
END;
PROCEDURE CRITERIODEESTABILIDAD;
BEGIN
CLRSCR;
WRITELN(' COEFICIENTE DE DIFUSION ',D[1]);
DELTAT:=(DX*DX)/(2*D[1]);
DELTATH:=DELTAT/60;
WRITELN('EL INTERVALO DE TIEMPO DEBE SER MENOR A : ',DELTAT:5:5, ' s ');
WRITE('DT ? : ');READLN(DT);
WHILE DT>DELTAT DO
BEGIN
WRITELN('ABSTENGASE DE SUMINISTRAR VALORES MAYORES A ',DELTAT:5:5);
WRITE('SUMINISTRE OTRO VALOR : ');READLN(DT);
END;
PROCEDURE CALCULOFOURIER;
BEGIN
FOR I:=1 TO N-2 DO
BEGIN
FO[I]=-(D[I]*DT)/(DX*DX);
COE[I]=1-(2*FO[I]);
END;END;
PROCEDURE TIEMPODEIMPRESION;
BEGIN
CLRSCR;
WRITELN('CUANTOS TIEMPOS SE IMPRIMIRA EL PERFIL : ');READLN(Q);
WRITELN('CUALES SON ESTOS TIEMPOS ( s ) : ');
FOR J:=1 TO Q DO
READLN(PT[J]);
TFIN:=PT[Q];
```

```

END;
PROCEDURE ASIGNACION;
BEGIN
FOR I:=1 TO N-2 DO
CP[I]:=CF[I];
CP[N-1]:=CINC;
END;
PROCEDURE GRABAR;
VAR NOMBRE: STRING[14];
F1: TEXT;
BEGIN
NOMBRE:='A:CICLO1.MOD';
ASSIGN(F1,NOMBRE);
APPEND(F1);
WRITELN(F1);
WRITELN(F1);
WRITELN(F1, ' Tiempo al cual se calcula el perfil : ',T:8:5);
GetTime(hora,minuto,segundo,centesima);
WRITELN(F1, ' SON LAS ',hora,':',minuto,':',segundo,':',centesima);
WRITELN(F1, ' POSICION      % EN PESO DE C ');
FOR I:=0 TO N-1 DO
WRITELN(F1, ' ', POS[I]:3:3, ' ', CF[I]:10:10);
CLOSE (F1);
J:=J+1;
END;
BEGIN
CLRSCR;
PRESENTACION;
LECTURADEDATOS;
FOR I:=1 TO N-1 DO
CP[I]:=CINC;
TEMP:=1194.111111;
CS:=1.25;
COEFICIENTEDEDIFUSION;

```

```
CRITERIODEESTABILIDAD;
CLRSR;TEXTCOLOR(CYAN);GOTOXY(30,12);WRITE(' Procesando. No interrumpir ');
J:=1;
T:=0;
T:=T+DT;
TEXTCOLOR(WHITE);
WHILE T<=TFIN DO
BEGIN
IF (0<=T) AND (T<=79200) THEN
BEGIN
TEMP:=1194.111111;
END
ELSE
IF (79200<T) AND (T<=126000) THEN
BEGIN
TEMP:=1183;
END;
IF (0<T) AND (T<=79200) THEN
BEGIN
CS:=1.25
END
ELSE
IF (79200<T) AND (T<=100800) THEN
BEGIN
CS:=(-0.0000208333*T)+2.9;
END
ELSE
IF (100800<T) AND (T<=126000) THEN
BEGIN
CS:=(-0.0000079365*T)+1.599999984;
END;
CP[0]:=CS;
COEFICIENTEDEDIFUSION;
CALCULOFOURIER;
```

```
CALCULOCONC
IF ((T-(DT/2))<=PT[J]) AND (PT[J]<=(T+(DT/2))) THEN
BEGIN
GRABAR;
WRITELN;WRITELN;
WRITELN(' TIEMPO : ',T:8:5);
WRITELN(' POSICION      % EN PESO DE C ');
FOR I:=0 TO N-1 DO
WRITELN(' ', POS[I]:10:10,' ',CF[I]:5:10);
END
ASIGNACION;
T:=T+DT;
ENO.
```

Tratamiento I DFI

```
PROGRAM IMPLICITO_TRATAMIENTO_1;
USES CRT, DOS;
VAR
A, B, C, D, V, FO, CP, CF, PT, POS, DIF, BETA, GAMMA:ARRAY[0..200] OF REAL;
DX, DT, CS, CINC, TEMP, TFIN:REAL;
I, J, Q, N, K, DM:INTEGER;
O:CHAR;
hora, minuto, segundo, centesima:WORD;
PROCEDURE LECTURADEDATOS;
BEGIN
CLRSCL;
WRITE('LONGITUD TOTAL DE DIFUSION ( cm ) : ');READLN(L);
WRITE('CONTENIDO DE CARBON INICIAL ( % wt ) : ');READLN(CINC);
WRITE('NUMERO DE NODOS : ');READLN(N);
DX:=L/(N-1);
DM:=N-2;
POS[1]:=0;
FOR I:=2 TO N DO
POS[I]:=(I-1)*DX*10;
END;
PROCEDURE TIEMPODEIMPRESION;
BEGIN
CLRSCL;
WRITELN('CUANTOS TIEMPOS SE IMPRIMIRA EL PERFIL ? (s) ');READLN(Q);
WRITELN('CUALES SON ESTOS TIEMPOS ? ');
FOR J:=1 TO Q DO
READLN(PT[J]);
TFIN:=PT[Q];
END;
PROCEDURE DELT;
BEGIN
CLRSCL;
```

```

WRITE('DT ? : ');READLN(DT);
WHILE DT<=0 DO
BEGIN
WRITE(' DT : ');
READLN(DT);
END;END;
PROCEDURE COEFICIENTEOEDIFUSION;
BEGIN
FOR I:=1 TO N DO
DIF[I]:=-exp(-32000/(1.987*TEMP))*(0.07+(0.06*CP[I]));
END;
PROCEDURE CALCULOFOURIER;
BEGIN
FOR I:=1 TO N DO
FO[I]:=(DIF[I]*DT)/(DX*DX);
END;
PROCEDURE MATRIDIAG;
BEGIN
B[1]:=1;
C[1]:=0;
D[1]:=-CP[1];
FOR I:=2 TO N-1 DO
B[I]:=-2-(1/FO[I]);
FOR I:=2 TO N-1 DO
C[I]:=1;
FOR I:=2 TO N-1 DO
A[I]:=1;
FOR I:=2 TO N-1 DO
D[I]:=-((1/FO[I])*CP[I]);
A[N]:=0;
B[N]:=1;
D[N]:=CINC;
BETA[1]:=B[1];
GAMMA[1]:=D[1]/BETA[1];

```

```

FOR I:=1 TO N DO
BEGIN
BETA[I]:=B[I]-((A[I]+C[I-1])/BETA[I-1]);
GAMMA[I]:=-(D[I]-A[I]*GAMMA[I-1])/BETA[I];
END;
V[N]:=GAMMA[N];
FOR K:=1 TO N-1 DO
BEGIN
I:=N-K;
V[I]:=GAMMA[I]-((C[I]+V[I+1])/BETA[I]);
END;
V[N]:=CINC;
END;
PROCEDURE ASIGNACION;
BEGIN
FOR I:=2 TO N DO
CP[I]:=V[I];
END;
PROCEDURE GRABAR;
VAR NOMBRE: STRING[14];
F1:TEXT;
BEGIN
NOMBRE:='A:CICLO1.MOD';
ASSIGN(F1,NOMBRE);
APPEND(F1);
WRITELN(F1);
WRITELN(F1);
WRITELN(F1,' Tiempo al cual se calcula el perfil : ',T:8:5);
GetTime(hora,minuto,segundo,centesima);
WRITELN(F1,' SON LAS ',hora,':',minuto,':',segundo,':',centesima);
WRITELN(F1,' POSICION      % EN PESO DE C ');
FOR I:=1 TO N DO
WRITELN(F1,' ', POS[I]:3:3,' ',V[I]:10:10);
CLOSE(F1);

```

```
J:=J+1;
END;
BEGIN
CLRSR;
PRESENTACION;
LECTURADEDATOS;
FOR I:=2 TO N DO
CP[I]:=-CINC;
TEMP:=1194.111111;
CP[1]:=1.25
COEFICIENTEDEDIFUSION;
DELT;
TIEMPODEIMPRESION;
TEXTCOLOR(CYAN);GOTOXY(30,12);WRITE(' Procesando. No interrumpir ')
T:=0 J:=1;T:=T*DT;
TEXTCOLOR(WHITE);
WHILE T<=TFIN DO
BEGIN
IF (0<=T) AND (T<=79200) THEN
BEGIN
TEMP:=1194.111111;
END
ELSE
IF (79200<T) AND (T<=126000) THEN
BEGIN
TEMP:=1183
END;
IF (0<T) AND (T<=79200) THEN
BEGIN
CS:=1.25
END
ELSE
IF (T<79200) AND (T<=100800) THEN
BEGIN
```

```
CS:=(-0.0000208333*T)+2.9;
END
ELSE
IF (100800<T) AND (T<=126000) THEN
BEGIN
CS:=(-0.0000079365*T)+1.599999984;
END;
CP[1]:=CS
COEFICIENTEDEDIFUSION;
CALCULOFOURIER;
MATRIDIAO;
IF ((T-(DT/2))<=PT[J]) AND (PT[J]<=(T+(DT/2))) THEN
BEGIN
GRABAR;
WRITELN;
WRITELN;
WRITELN(' TIEMPO : ',T:0:5);
WRITELN(' POSICION      % EM PESO DE C ');
FOR I:=1 TO M DO
WRITELN(' ', POS[I]:3:3, ' ',V[I]:10:10);
END;
ASIGNACION;
T:=T+DT
END.
```

Tratamiento I CN

```
PROGRAM CRANK_NICOLSON_TRATAMIENTO_1;
USES CRT, DOS;
VAR
  A, B, C, D, V, FO, CP, CF, PT, POS, DIF, BETA, GAMMA:ARRAY[0..200] OF REAL;
  L, T, DX, DT, CS, CINC, TFIN:REAL;
  I, J, Q, N, K, DM:INTEGER;
  O:CHAR;
  hora, minuto, segundo, centesima:WORD;
PROCEDURE LECTURADEDATOS;
BEGIN
  CLRSCR;
  WRITE('LONGITUD TDTAL DE DIFUSION ( cm ) : ');READLN(L);
  WRITE('CONTENIDO DE CARBON INICIAL ( % wt ) : ');READLN(CINC);
  WRITE('NUMERO DE MODOS : ');READLN(N);
  DX:=L/(N-1);
  DM:=N-2;
  POS[1]:=0;
  FOR I:=2 TO N DO
  POS[I]:= (I-1)*DX*10;
  END;
PROCEDURE TIEMPODEIMPRESION;
BEGIN
  CLRSCR;
  WRITELN('CUANTOS TIEMPOS SE IMPRIMIRA EL PERFIL ? (n) ');
  READLN(Q);
  WRITELN('CUALES SON ESTOS TIEMPOS ? :');
  FOR J:=1 TO Q DO
  READLN(PT[J]);
  TFIN:=PT[Q];
  END
PROCEDURE DELT;
BEGIN
```

```

CLRSR;
WRITE('DT ? : ');READLN(DT);
WHILE DT<=0 DO
BEGIN
WRITE(' DT : ');READLN(DT);
END;END;
PROCEDURE COEFICIENTEDEDIFUSION;
BEGIN
FOR I:=1 TO N DO
DIF[I]:=exp(-32000/(1.987*TEMP))*(0.07+(0.06*CP[I]));
END;
PROCEDURE CALCULOFOURIER;
BEGIN
FOR I:=1 TO N DO
FO[I]:=(DIF[I]*DT)/(DX*DX);
END;
PROCEDURE MATRIDIAO;
BEGIN
V[1]:=CS;
B[1]:=-1;
C[1]:=0;
D[1]:=CP[1];
FOR I:=2 TO N-1 DO
B[I]:=-1/2-(1/(2*FO[I]));
FOR I:=2 TO N-1 DO
C[I]:=1/2;
FOR I:=2 TO N-1 DO
A[I]:=-1/2
FOR I:=2 TO N-1 DO
D[I]:=CP[I]*((1/2)-(1/(2*FO[I]))-FO[I])+(FO[I]/2)*(CP[I+1]+CP[I-1]));
B[N]:=-1;
A[N]:=0;
D[N]:=CINC;
BETA[1]:=B[1];

```

```

GAMMA[1]:=D[1]/BETA[1];
FOR I:=2 TO N DO
BEGIN
BETA[I]:=B[I]-((A[I]*C[I-1])/BETA[I-1]);
GAMMA[I]:=-(D[I]-((A[I]*GAMMA[I-1]))/BETA[I]);
END;
V[N]:=GAMMA[N];
FOR K:=1 TO N-2 DO
BEGIN
I:=N-K;
V[I]:=GAMMA[I]-((C[I]*V[I+1])/BETA[I]);
END;
V[N]:=CINC;
END;
PROCEDURE ASIGNACION;
BEGIN
FOR I:=2 TO N DO
CP[I]:=V[I];
END;
PROCEDURE GRABAR;
VAR NOMBRE: STRING[14];
F1:TEXT;
BEGIN
NOMBRE:='A:CICLO1.MOD';
ASSIGN(F1,NOMBRE);
APPEND(F1);
WRITELN(F1);
WRITELN(F1);
WRITELN(F1,' Tiempo al cual se calcula el perfil : ',T:8:5);
GetTime(hora,minuto,segundo,centesima);
WRITELN(F1,' SON LAS ',hora,':',minuto,':',segundo,':',centesima);
WRITELN(F1,' POSICION      % EN PESO DE C ');
FOR I:=1 TO N DO
WRITELN(F1,' ', POS[I]:3:3,' ',V[I]:10:10);

```

```

CLOSE(F1);
J:=J+1;BEGIN
CLRSCR; {PROGRAMA PRINCIPAL}
PRESENTACION
LECTURADEDATOS;
FOR I:=2 TO N DD
CP[I]:=CINC;
TEMP:=1194.111111;
CS:=1.25;
DELT;
TIEMPODEIMPRESION;
CLRSCR;TEXTCOLOR(CYAN);GOTOXY(30,12);WRITE(' Procesando. No interrumpir ');
T:=0;J:=1;T:=T+DT;
TEXTCOLOR(WHITE);
WHILE T<=TFIN DO
BEGIN
IF (0<=T) AND (T<=79200) THEN
BEGIN
TEMP:=1194.111111;
END
ELSE
IF (79200<T) AND (T<=126000) THEN
BEGIN
TEMP:=1183
END;
IF (0<T) AND (T<=79200) THEN
BEGIN
CS:=1.25;
END
ELSE
IF (T<79200) AND (T<=100800) THEN
BEGIN
CS:=(-0.0000208333*T)+2.9
END

```

```
ELSE
IF (100800<T) AND (T<=126000) THEN
BEGIN
CS:=(-0.0000079365*T)+1.599999984;
END;
CP[1]:=CS;
COEFICIENTEDEDIFUSION;
CALCULOFOURIER
MATRIDIAG;
IF ((T-(DT/2))<=PT[J]) AND (PT[J]<=(T+(DT/2))) THEN
BEGIN
GRABAR;
WRITELN;WRITELN;
WRITELN(' TIEMPO : ',T:8:5);
WRITELN(' POSICION      % EN PESO DE C ');
FOR I:=1 TO M DO
WRITELN(' ', POS[I]:3:3, ' ',V[I]:10:10);
END;
ASIGNACION;
T:=T+DT;
END.
```

**ESTA TESIS NO DEBE
SALIR DE LA BIBLIOTECA**

Tratamiento II DFE

```
PROGRAM METODO_EXPLICITD_TRATAMIENTO_2;
USES CRT,DOS;
TYPE
LETRA=ARRAY[0..200] OF REAL;
VAR
I, N, Q, J, F, P:INTEGER;
CP, CF, COE, FO, PT, POS:LETRA;
D:LETRA;
DELTAT, CS, CINC, DT, L, DX, TFIN, T, CI:REAL;
TEMP, DELTATH, B:REAL;
O, S:CHAR;
hora, minuto, segundo, centesima:WORD;
PROCEDURE LECTURADEDATOS;
BEGIN
CLRSCL;
WRITE('LONGITUD TDTAL DE DIFUSION (cm) : ');READLN(L);
WRITE('CONCENTRACION DE CARBON INICIAL ( % wt ) : ');READLN(CINC);
WRITELN('NUMERO DE NODOS : ');READLN(N);
DX:=L/(N-1);
POS[0]:=0;
FOR I:=1 TO N-1 DO
POS[I]:=I*DX*10;
END;
PROCEDURE COEFICIENTEDEDIFUSION;
BEGIN
FOR I:=1 TO N-1 DO
D[I]:=exp(-32000/(1.987*TEMP))*(0.07*(0.06*CP[I]));
END;
PROCEDURE CALCULOCONC;
BEGIN
CF[0]:=CS;
FOR I:=1 TO N-2 DO
```

```
CF[I]:=CP[I]*COE[I]+FO[I]*(CP[I-1]+CP[I+1]);
CF[N-1]:=CINC;
END;
PROCEDURE CRITERIODEESTABILIDAD;
BEGIN
  CLRSCR;
  WRITELN('COEFICIENTE DE DIFUSION : ',D[1]);
  DELTAT:=(DX*DX)/(2*D[1]);
  DELTATH:=DELTAT/60;
  WRITELN('EL INTERVALO DE TIEMPO DEBE SER MENOR A : ',DELTAT*5*5, ' s ');
  WRITE('DT ? : ');
  READLN(DT);
  WHILE DT>DELTAT DO
  BEGIN
    WRITELN('ABSTENGASE DE SUMINISTRAR VALORES MAYORES A ',DELTAT*5*5);
    WRITE('SUMINISTRE OTRO VALOR : ');READLN(DT);
  END;END;
PROCEDURE CALCULOFOURIER;
BEGIN
  FOR I:=1 TO N-2 DO
  BEGIN
    FO[I]:=(O[I]*DT)/(DX*DX);
    COE[I]:=1-(2*FO[I]);
  END;END;
PROCEDURE TIEMPODEIMPRESION;
BEGIN
  CLRSCR;
  WRITELN('CUANTOS TIEMPOS SE IMPRIMIRA EL PERFIL : ');READLN(Q);
  WRITELN('CUALES SON ESTOS TIEMPOS ( s ) : ');
  FOR J:=1 TO Q DO
  READLN(PT[J]);
  TFIN:=PT[Q];
END
PROCEDURE ASIONACION;
```

```

BEGIN
FOR I:=1 TO N-2 DO
CP[I]:=CF[I];
END;
PROCEDURE GRABAR;
VAR NOMBRE: STRING[14];
F1:TEXT;
BEGIN
NOMBRE:='A:CICLO2.MOD';
ASSIGN(F1,NOMBRE);
APPEND(F1);
WRITELN(F1);
WRITELN(F1);
WRITELN(F1,' Tiempo al cual se calcula el perfil : ',T:8:5);
GetTime(hora,minuto,segundo,centesima);
WRITELN(F1,' SON LAS ',hora,':',minuto,':',segundo,':',centesima);
WRITELN(F1,' POSICION      % EN PESO DE C ');
FOR I:=0 TO M-1 DO
WRITELN(F1,' ', POS[I]:3:3,' ', CF[I]:10:10);
CLOSE(F1);
J:=J+1;
END;
BEGIN
CLRSCR;
PRESENTACION;
LECTURADEDATOS;
FOR I:=1 TO N-1 DO
CP[I]:=CINC;
TEMP:=1088.655556;
COEFICIENTEDEDIFUSION;
CRITERIODEESTABILIDAD;
TIEMPODEIMPRESION;
CLRSCR;TEXTCOLOR(CYAN);GOTOXY(30,12);WRITE(' Procesando. No interrumpir ');
J:=1;T:=0;T:=T+DT;

```

```
TEXTCOLOR(WHITE);
WHILE T<=TFIN DO
BEGIN
IF (0<=T) AND (T<=2199.999996) THEN
BEGIN
TEMP:=(0.05050505*T)+1088.555556;
END
ELSE
IF (2199.999996<T) AND (T<=22159.998) THEN
BEGIN
TEMP:=1199.666667
END
ELSE
IF (22159.998<T) AND (T<=25759.998) THEN
BEGIN
TEMP:=(-0.023602037*T)+1722.68776
END
ELSE
IF (25759.998<T) AND (T<=28800) THEN
BEGIN
TEMP:=1114.699333;
END;
IF (0<T) AND (T<=2199.999996) THEN
BEGIN
CS:=(0.0001818181*T)+0.9;
END
ELSE
IF (2199.999996<T) AND (T<=8759.988) THEN
BEGIN
CS:=(-0.00000381098*T)+1.30838416;
END
ELSE
IF (8759.988<T) AND (T<=22159.998) THEN
BEGIN
```

```
CS:=1.275;
END
ELSE
IF (22159.998<T) AND (T<=25759.998) THEN
BEGIN
CS:=(-0.000055555555*T)+2.50611;
END
ELSE
IF (25759.998<T) AND (T<=28800) THEN
BEGIN
CS:=1.075;
END;
CP[0]:=CS;
COEFICIENTEDEFUSION;
CALCULOFOURIER;
CALCULOCONC
IF ((T-(DT/2))<=PT[J]) AND (PT[J]<=(T+(DT/2))) THEN
BEGIN
GRABAR;
WRITELN;WRITELN;
WRITELN(' TIEMPO : ',T:8:5);
WRITELN(' POSICION      % EM PESO DE C ');
FOR I:=0 TO M-1 DO
WRITELN(' ', POS[I]:10:10,' ',CF[I]:5:10);
END;
ASIGNACION;
T:=T+DT;END.
```

Tratamiento II DFI

```

PROGRAM IMPLICITO_TRATAMIENTO_2;
USES CRT, DOS;
VAR
A, B, C, D, V, FQ, CP, CF, PT, POS, DIF, BETA, GAMMA:ARRAY[0..200] OF REAL;
L, T, DX, DT, CS, CINC, TEMP, TFIN:REAL;
I, J, Q, N, K, DM:INTEGER;
O:CHAR;
hora, minuto, segundo, centesima:WORD;
PROCEDURE LECTURADEDATOS;
BEGIN
CLRSCR;
WRITE('LONGITUD TOTAL DE DIFUSION ( cm ) : ');READLN(L);
WRITE('CONTENIDO DE CARBON INICIAL ( % wt ) : ');READLN(CINC);
WRITE('NUMERO DE NODOS : ');READLN(N);
DX:=L/(N-1);
POS[1]:=0
FOR I:=2 TO N DO
POS[I]:= (I-1)*DX*10;
END;
PROCEDURE TIEMPODEIMPRESION;
BEGIN
CLRSCR;
WRITELN('CUANTOS TIEMPOS SE IMPRIMIRA EL PERFIL ? (e) ');READLN(Q);
WRITELN('CUALES SON ESTOS TIEMPOS ? ');
FOR J:=1 TO Q DO
READLN(PT[J]);
TFIN:=PT[Q];
END
PROCEDURE DELT;
BEGIN
CLRSCR;
WRITE('DT ? : ');READLN(DT);

```

```

WHILE DT<=0 DO
BEGIN
WRITE(' DT : ');READLN(DT);
END;END;
PROCEDURE COEFICIENTEDEDIFUSION;
BEGIN
FOR I:=1 TO N DO
DIF[I]:=exp(-32000/(1.987*TEMP))*(0.07+(0.06*CP[I]));
END
PROCEDURE CALCULOFOURIER;
BEGIN
FOR I:=1 TO N DO
FO[I]:=(DIF[I]*DT)/(DX*DX);
END;
PROCEDURE MATRIDIAQ;
BEGIN
V[1]:=CS;
B[1]:=1;
C[1]:=0;
D[1]:=CP[1];
FOR I:=2 TO N-1 DO
B[I]:=-2-(1/FO[I]);
FOR I:=2 TO N-1 DO
C[I]:=1;
FOR I:=2 TO N-1 DO
A[I]:=1;
FOR I:=2 TO N-1 DO
D[I]:=-(1/FO[I])*CP[I];
B[N]:=1;
A[N]:=0
D[N]:=CINC;
BETA[1]:=B[1];
GAMMA[1]:=D[1]/BETA[1];
FOR I:=2 TO N DO

```

```

BEGIN
BETA[I]:=B[I]-((A[I]*C[I-1])/BETA[I-1]);
GAMMA[I]:=(D[I]-((A[I]*GAMMA[I-1])))/BETA[I];
END;
V[N]:=GAMMA[N];
FOR K:=1 TO N-2 DO
BEGIN
I:=N-K;
V[I]:=GAMMA[I]-((C[I]*V[I+1])/BETA[I]);
END;
V[N]:=CINC;
END;
PROCEDURE ASIGNACION;
BEGIN
FOR I:=2 TO N DO
CP[I]:=V[I];
END;
PROCEDURE GRABAR;
VAR NOMBRE: STRING[14];
F1:TEXT
BEGIN
NOMBRE:='A:CICLO2.MOD';
ASSIGN(F1,NOMBRE);
APPEND(F1);
WRITELN(F1);
WRITELN(F1);
WRITELN(F1,' Tiempo al cual se calcula el perfil : ',T:8:5);
GetTime(hora,minuto,segundo,centesima);
WRITELN(F1,' SON LAS ',hora,':',minuto,':',segundo,':',centesima);
WRITELN(F1,' POSICION      % EN PESO DE C ');
FOR I:=1 TO N DO
WRITELN(F1,' ', POS[I]:3:3, ' ',V[I]:10:10);
CLOSE(F1);
J:=J+1;

```

```
END;
BEGIN
  CLRSCR;
  PRESENTACION;
  LECTURADEDATOS
  FOR I:=2 TO N DO
    CP[I]:=CING;
    TEMP:=1088.555556;
    DELT;
    TIEMPODEIMPRESION;
    CLRSCR;TEXTCOLOR(CYAN);GOTOXY(30,12);WRITE(' Procesando. No interrumpir ');
    T:=0;J:=1;T:=T+DT;
    TEXTCOLOR(WHITE);
    WHILE T<=TFIN DO
      BEGIN
        IF (0<=T) AND (T<=2199.999996) THEN
          BEGIN
            TEMP:=(0.05050505*T)+1088.555556;
          END
        ELSE
          IF (2199.999996<T) AND (T<=22159.998) THEN
            BEGIN
              TEMP:=1199.666667
            END
          ELSE
            IF (22159.998<T) AND (T<=25759.998) THEN
              BEGIN
                TEMP:=(-0.023602037*T)+1722.68776;
              END
            ELSE
              IF (25759.998<T) AND (T<=28800) THEN
                BEGIN
                  TEMP:=1114.699333
                END;
              END;
```

```
IF (0<T) AND (T<=2199.999996) THEN
BEGIN
CS:=(0.0001818181*T)+0.9;
END
ELSE
IF (2199.999996<T) AND (T<=8759.988) THEN
BEGIN
CS:=(-0.00000381098*T)+1.30838416;
END
ELSE
IF (8759.988<T) AND (T<=22159.998) THEN
BEGIN
CS:=1.275;
END
ELSE
IF (22159.998<T) AND (T<=25759.998) THEN
BEGIN
CS:=(-0.000055555555*T)+2.50611;
END
ELSE
IF (25759.998<T) AND (T<=28800) THEN
BEGIN
CS:=1.075;
END;
CP[1]:=CS;
COEFICIENTEDEDIFUSION;
CALCULOFOURIER;
MATRIDIAG
IF ((T-(DT/2))<=PT[J]) AND (PT[J]<=(T+(DT/2))) THEN
BEGIN
GRABAR;
WRITELN;WRITELN;
WRITELN(' TIEMPO : ',T:8:5);
WRITELN(' POSICION      % EN PESO DE C ');
```

```
FOR I:=1 TO N DO
WRITELN(' ', POS[I]:3:3, ' ', V[I]:10:10);
END;
ASIGNACION;
T:=T+DT;
END.
```

Tratamiento II CN

```

PROGRAM CRANK_NICOLSON_TRATAMIENTO_2;
USES CRT, DOS;
VAR
A, B, C, D, V, FO, CP, CF, PT, POS, DIF, BETA, GAMMA:ARRAY[0..200] OF REAL;
L, T, DX, DT, CS, CINC, TEMP, TFIN:REAL;
I, J, Q, N, K, DM:INTEGER;
NOMBREAL:STRING[14];
O:CHAR;
hora, minuto, segundo, centesima:WORD;
PROCEDURE LECTURADEDATOS;
BEGIN
CLRSR;
WRITE('LONGITUD TOTAL DE DIFUSION ( cm ) : ');READLN(L);
WRITE('CONTENIDO DE CARBON INICIAL ( % wt ) : ');READLN(CINC);
WRITE('NUMERO DE NODOS : ');READLN(N);
DX:=L/(N-1);
POS[1]:=0;
FOR I:=2 TO N DO
POS[I]:=-(I-1)*DX*10;
END;
PROCEDURE TIEMPODEIMPRESION;
BEGIN
CLRSR
WRITELN('CUANTOS TIEMPOS SE IMPRIMIRA EL PERFIL ? (n) ');READLN(Q);
WRITELN('CUALES SON ESTOS TIEMPOS ? ');
FOR J:=1 TO Q DO
READLN(PT[J]);
TFIN:=PT[Q];
END;
PROCEDURE DELT;
BEGIN
CLRSR;

```

```

WRITE('DT ? : ');
READLN(DT);
WHILE DT<=0 DO
BEGIN
WRITE(' DT : ');
READLN(DT);
END;
PROCEDURE COEFICIENTEDEDIFUSION;
BEGIN
FOR I:=1 TO N DO
DIF[I]:=exp(-32000/(1.987*TEMP))*(0.07+(0.06*CP[I]));
END;
PROCEDURE CALCULOFOURIER;
BEGIN
FOR I:=1 TO N DO
FO[I]:=(DIF[I]*DT)/(DX*DX);
END
PROCEDURE MATRIDIAG;
BEGIN
V[1]:=CS;
B[1]:=1;
C[1]:=0;
D[1]:=CP[1];
FOR I:=2 TO N-1 DO
B[I]:=-(1/2)-(1/(2*FO[I]));
FOR I:=2 TO N-1 DO
C[I]:=1/2;
FOR I:=2 TO N-1 DO
A[I]:=1/2;
FOR I:=2 TO N-1 DO
D[I]:=CP[I]*((1/2)-(1/(2*FO[I]))-FO[I])+(FO[I]/2)*(CP[I+1]+CP[I-1]);
A[N]:=0;
B[N]:=1;
D[N]:=CINC

```

```

BETA[1]:=B[1];
GAMMA[1]:=D[1]/BETA[1];
FOR I:=2 TO N DO
BEGIN
BETA[I]:=B[I]-((A[I]*C[I-1])/BETA[I-1]);
GAMMA[I]:=(D[I]-A[I]*GAMMA[I-1])/BETA[I];
END;
V[N]:=-GAMMA[N];
FOR K:=1 TO N-2 DO
BEGIN
I:=N-K;
V[I]:=-GAMMA[I]-((C[I]*V[I+1])/BETA[I]);
END;
V[N]:=CINC;
END
PROCEDURE ASIGNACION;
BEGIN
FOR I:=2 TO N DO
CP[I]:=V[I];
END;
PROCEDURE GRABAR;
VAR NOMBRE: STRING[14];
F1:TEXT
BEGIN
NOMBRE:='A:CICLO2.MOD';
ASSIGN(F1,NOMBRE);
APPEND(F1);
WRITELN(F1);
WRITELN(F1);
WRITELN(F1,' Tiempo al cual se calcula el perfil : ',T:8:5);
GetTime(hora,minuto,segundo,centesima);
WRITELN(F1,' SON LAS ',hora,':',minuto,':',segundo,':',centesima);
WRITELN(F1,' POSICION      % EN PESO DE C ');
FOR I:=1 TO N DO

```

```
WRITELN(F1,' ', POS[I]:3:3,' ',V[I]:10:10);
CLOSE(F1);
J:=J+1;
END;
BEGIN
CLRSCR;
PRESENTACION;
LECTURADEDATOS;
FOR I:=2 TO N DO
CP[I]:=CINC;
TEMP:=1088.555556;
OELT;
TIEMPODEIMPRESION;
CLRSCR;TEXTCOLOR(CYAN);OOTOKY(30,12);WRITE(' Procesando. No interrumpir ');
T:=0;J:=1;T:=T+DT;
TEXTCOLOR(WHITE);
WHILE T<=TFIN DO
BEGIN
IF (0<=T) AND (T<=2199.999996) THEN
BEGIN
TEMP:=(0.05060505*T)+1088.555556;
END
ELSE
IF (2199.999996<T) AND (T<=22159.998) THEN
BEGIN
TEMP:=1199.666667;
END
ELSE
IF (22159.998<T) AND (T<=25759.998) THEN
BEGIN
TEMP:=(-0.023602037*T)+1722.68776;
END
ELSE
IF (25759.998<T) AND (T<=28800) THEN
```

```
BEGIN
TEMP:=1114.699333;
END;
IF (0<T) AND (T<=2199.999996) THEN
BEGIN
CS:=(0.0001818181*T)+0.9;
END
ELSE
IF (2199.999996<T) AND (T<=8759.988) THEN
BEGIN
CS:=(-0.00000381098*T)+1.30838416;
END
ELSE
IF (8759.988<T) AND (T<=22159.998) THEN
BEGIN
CS:=1.276
END
ELSE
IF (22159.998<T) AND (T<=25759.998) THEN
BEGIN
CS:=(-0.000055555555*T)+2.50611;
END
ELSE
IF (25759.998<T) AND (T<=28800) THEN
BEGIN
CS:=1.076;
END;
CP[1]:=CS;
COEFICIENTEDEDIFUSION;
CALCULOFOURIER;
MATRIDIAO
IF ((T-(DT/2))<=PT[J]) AND (PT[J]<=(T+(DT/2))) THEN
BEGIN
GRABAR;
WRITELN;WRITELN;
```

```
WRITELN(' TIEMPO : ',T:8:5);  
WRITELN(' POSICION      % EN PESO DE C ');  
FOR I:=1 TO N DO  
  WRITELN(' ', POS[I]:3:3,' ',V[I]:10:10);  
END;  
ASIGNACION;  
T:=T+DT;  
END.
```

Tratamiento III DFE

```
PROGRAM METODO_EXPLICITO_TRATAMIENTO_3;
USES CRT, DOS;
TYPE
LETRA=ARRAY[0..200] OF REAL;
VAR
I, N, Q, J, F, P:INTEGER;
CP, CF, COE, FO, PT, POS:LETRA;
D, CATE:LETRA;
hora, minuto, segundo, centesima:WORD;
DELTAT, CS, CINC, DT, L, DX, TFIN, T, CI:REAL;
TEMP, DELTATH, B:REAL;
O, S:CHAR;
PROCEDURE LECTURADEDATOS;
BEGIN
CLRSCR;
WRITE('LONGITUD TOTAL DE DIFUSION (cm) : ');READLN(L);
WRITE('CONCENTRACION DE CARBON INICIAL ( % wt ) : ');READLN(CINC);
WRITELN('NUMERO DE NODOS : ');READLN(N);
DX:=L/(N-1);
POS[0]:=0;
FOR I:=1 TO N-1 DO
POS[I]:=I*DX*10;
END;
PROCEDURE COEFICIENTEDEDIFUSION;
BEGIN
FOR I:=1 TO N-1 DO
D[I]:=exp(-32000/(1.987*TEMP))*(0.07+(0.06*CP[I]));
END
PROCEDURE CALCULOCONC;
BEGIN
CF[0]:=CS;
FOR I:=1 TO N-2 DO
```

```

CF[I]:=-CP[I]*COE[I]+FO[I]*(CP[I-1]+CP[I+1]);
CF[N-1]:=CINC;
END
PROCEDURE CRITERIODEESTABILIDAD;
BEGIN
CLRSR;
WRITELN(' COEFICIENTE DE DIFUSION ',D[1]);
DELTAT:=(DX*DX)/(2*D[1]);
DELTATH:=DELTAT/60;
WRITELN('EL INTERVALO DE TIEMPO DEBE SER MENOR A : ',DELTAT:5:5, ' s ');
WRITE('DT ? : ');READLN(DT);
WHILE DT>DELTAT DO
BEGIN
WRITELN('ABSTENGASE DE SUMINISTRAR VALORES MAYORES A ',DELTAT:5:5);
WRITE('SUMINISTRE OTRO VALOR : ');READLN(DT);
END
PROCEDURE CALCULOFDURIER;
BEGIN
FOR I:=1 TO N-2 DO
BEGIN
FO[I]:=(D[I]*DT)/(DX*DX);
COE[I]:=1-(2*FO[I]);
END;END;
PROCEDURE TIEMPODEIMPRESION;
BEGIN
CLASCR;
WRITELN('CUANTOS TIEMPOS SE IMPRIMIRA EL PERFIL : ');READLN(Q);
WRITELN('CUALES SON ESTOS TIEMPOS ( s ) : ');
FOR J:=1 TO Q DO
READLN(PT[J]);
TFIN:=PT[Q];
END;
PROCEDURE ASIGNACION;
BEGIN

```

```

FOR I:=1 TO N-2 DO
CP[I]:=CF[I];
END;
PROCEDURE GRABAR;
VAR NOMBRE: STRING[14];
F1:TEXT;
BEGIN
NOMBRE:='A:CICLO3.MOD';
ASSIGN(F1,NOMBRE);
APPEND(F1);
WRITELN(F1);
WRITELN(F1);
WRITELN(F1,' Tiempo al cual se calcula el perfil : ',T:8:5);
GetTime(hora,minuto,segundo,centesima);
WRITELN(F1,' SON LAS ',hora,':',minuto,':',segundo,':',centesima);
WRITELN(F1,' POSICION      % EN PESO DE C ');
FOR I:=0 TO N-1 DO
WRITELN(F1,' ', POS[I]:3:3,' ',CF[I]:10:10);
CLOSE(F1);
J:=J+1;
END;
BEGIN
CLASCR;
PRESENTACION;
LECTURADEDATOS;
FOR I:=1 TO N-1 DO
CP[I]:=CINC;
TEMP:=1088.555556;
CS:=1.15;
COEFICIENTEDEDIFFUSION;
CRITERIODEESTABILIDAD;
TIEMPODEIMPRESION;
CLRSCR:TEXTCOLOR(CYAN);GOTOXY(30,12);WRITE(' Procesando. No interrumpir ');
J:=1;T:=0;T:=T+DT;

```

```
TEXTCOLOR(WHITE);
WHILE T<=TFIN DD
BEGIN
IF (0<=T) AND (T<=1636.36362) THEN
BEGIN
TEMP:=(0.067901235*T)+1088.555556;
END
ELSE
IF (1636.36362<T) AND (T<=19309.09072) THEN
BEGIN
TEMP:=1199.666667
END;
IF (0<T) AND (T<=981.818172) THEN
BEGIN
CS:=1.15;
END
ELSE
IF (981.818172<T) AND (T<=1636.36362) THEN
BEGIN
CS:=(0.00024826389*T)+0.906250001;
END
ELSE
IF (1636.36362<T) AND (T<=12109.09079) THEN
BEGIN
CS:=1.3125
END
ELSE
IF (12109.09079<T) AND (T<=19309.09072) THEN
BEGIN
CS:=(-0.00004166666*T)+1.817045449;
END;
CP[0]:=CS;
COEFICIENTEDEDIFUSION;
CALCULOFOURIER;
```

```
CALCULOCONC;  
IF ((T-(DT/2))<=PT[J]) AND (PT[J]<=(T+(DT/2))) THEN  
BEGIN  
GRABAR;  
WRITELN;WRITELN;  
WRITELN(' TIEMPO : ',T:8:5);  
WRITELN(' POSICION      % EN PESO DE C ');  
FOR I:=0 TO N-1 DO  
WRITELN(' ', POS[I]:10:10,' ',CF[I]:5:10);  
END;  
ASIGNACION  
T:=T+DT;  
END.
```

Tratamiento III DFI

```
PROGRAM IMPLICITO_TRATAMIENTO_3;
USES CRT, DOS;
VAR
  A, B, C, D, V, FO, CP, CF, PT, POS, DIF, BETA, GAMMA:ARRAY[0..200] OF REAL;
  L, T, DX, DT, CS, CINC, TEMP, TFIN:REAL;
  I, J, Q, N, K, DM:INTEGER;
  O:CHAR;
  hora, minuto, segundo, centesima:WORD;
PROCEDURE LECTURADEDATOS;
BEGIN
  CLRSCR;
  WRITE('LONGITUD TOTAL DE DIFUSION ( cm ) : ');READLN(L);
  WRITE('CONTENIDO DE CARBON INICIAL ( % wt ) : ');READLN(CINC);
  WRITE('NUMERO DE NODOS : ');READLN(N);
  DX:=L/(N-1);
  POS[1]:=0;
  FOR I:=2 TO N DO
  POS[I]:= (I-1)*DX*10;
  END
PROCEDURE TIEMPODEIMPRESION;
BEGIN
  CLRSCR;
  WRITELN('CUANTOS TIEMPOS SE IMPRIMIRA EL PERFIL ? (n) ');READLN(Q);
  WRITELN('CUALES SON ESTOS TIEMPOS ? :');
  FOR J:=1 TO Q DO
  READLN(PT[J]);
  TFIN:=PT[Q];
  END;
PROCEDURE DELTA;
BEGIN
  CLRSCR;
  WRITE('DT ? : ');READLN(OT);
```

```

WHILE DT<=0 DO
BEGIN
WRITE(' DT : ');READLN(DT);
END
PROCEDURE COEFICIENTEDEDIFUSION;
BEGIN
FOR I:=1 TO N DO
DIF[I]:=exp(-32000/(1.987*TEMP))*(0.07+(0.06*CP[I]));
END;
PROCEDURE CALCULOFOURIER;
BEGIN
FOR I:=1 TO N DO
FO[I]:=(DIF[I]DT)/(DX*DX);
END;
PROCEDURE MATRIDIAQ;
BEGIN
V[1]:=CS;
B[1]:=1;
C[1]:=0;
D[1]:=CP[1]
FOR I:=2 TO N-1 DO
B[I]:=-2-(1/FO[I]);
FOR I:=2 TO N-1 DO
C[I]:=1;
FOR I:=2 TO N-1 DO
A[I]:=1;
FOR I:=2 TO N-1 DO
D[I]:=-(1/FO[I])*CP[I];
B[N]:=1;
A[N]:=0;
D[N]:=CING;
BETA[1]:=B[1];
GAMMA[1]:=D[1]/BETA[1];
FOR I:=2 TO N DO

```

```

BEGIN
BETA[I]:=B[I]-((A[I]*C[I-1])/BETA[I-1]);
GAMMA[I]:=D[I]-((A[I]*GAMMA[I-1])/BETA[I]);
END;
V[N]:=GAMMA[N];
FOR K:=1 TO N-1 DO
BEGIN
I:=N-K;
V[I]:=GAMMA[I]-((C[I]*V[I+1])/BETA[I]);
END;
V[N]:=CINC;
END
PROCEDURE ASIGNACION;
BEGIN
FOR I:=2 TO N DO
CP[I]:=V[I];
END;
PROCEDURE GRABAR;
VAR NOMBRE: STRING[14];
F1:TEXT;
BEGIN
NOMBRE:='A:CICLOS.MOD';
ASSIGN(F1,NOMBRE);
APPEND(F1);
WRITELN(F1);
WRITELN(F1);
WRITELN(F1,' Tiempo al cual se calcula el perfil : ',T:8:5);
GetTime(hora,minuto,segundo,centesima);
WRITELN(F1,' SON LAS ',hora,':',minuto,':',segundo,':',centesima);
WRITELN(F1,' POSICION      % EN PESO DE C ');
FOR I:=1 TO N DO
WRITELN(F1,' ', POS[I]:3:3,' ',V[I]:10:10);
CLOSE(F1);
J:=J+1;

```

```
END
BEGIN
CLRSCR;
PRESENTACION;
LECTURADEDATOS;
FOR I:=2 TO N DO
CP[I]:=CINC;
TEMP:=1088.555556;
CS:=1.15;
DELT;
TIEMPODEIMPRESION;
CLRSCR;TEXTCOLOR(CYAN);GOTOXY(30,12);WRITE(' Procesando. No interrumpir ');
T:=0;J:=1;T:=T+DT;
TEXTCOLOR(WHITE);
WHILE T<=TFIN DO
BEGIN
IF (0<=T) AND (T<=1636.36362) THEN
BEGIN
TEMP:=(0.067901235*T)+1088.555556;
END
ELSE
IF (1636.36362<T) AND (T<=19309.09072) THEN
BEGIN
TEMP:=1199.666667
END;
IF (0<T) AND (T<=981.818172) THEN
BEGIN
CS:=1.15;
END
ELSE
IF (981.818172<T) AND (T<=1636.36362) THEN
BEGIN
CS:=(0.00024826389*T)+0.906250001
END
END
```

```
ELSE
IF (1636.36362<T) AND (T<=12109.09079) THEN
BEGIN
CS:=1.3125;
END
ELSE
IF (12109.09079<T) AND (T<=19309.09072) THEN
BEGIN
CS:=(-0.000041666666*T)+1.817045449;
END;
CP[1]:=CS;
COEFICIENTEDEDIFUSION;
CALCULOFOURIER;
MATRIDIAG;
IF ((T-(DT/2))<=PT[J]) AND (PT[J]<=(T+(DT/2))) THEN
BEGIN
GRABAR;
WRITELN;WRITELN;
WRITELN(' TIEMPO : ',T:8:5);
WRITELN(' POSICION      % EN PESO DE C ');
FOR I:=1 TO N DO
WRITELN(' ', POS[I]:3:3, ' ',V[I]:10:10);
END;
ASIGNACION;
T:=T+DT;
END.
```

Tratamiento III CN

```
PROGRAM CRANK_NICOLSON_TRATAMIENTO_3;
USES CRT, DOS;
VAR
  A, B, C, D, V, FO, CP, CF, PT, POS, DIP, BETA, GAMMA:ARRAY[0..200] OF REAL;
  L, T, DX, DT, CS, CINC, TEMP, TFIN:REAL;
  I, J, Q, N, K, DM:INTEGER;
  O:CHAR;
  hora, minuto, segundo, centesima:WORD;
PROCEDURE LECTURADEDATOS;
BEGIN
  CLRSCR;
  WRITE('LONGITUD TOTAL DE DIFUSION ( cm ) : ');READLN(L);
  WRITE('CONTENIDO DE CARBON INICIAL ( % wt ) : ');READLN(CINC);
  WRITE('NUMERO DE NODOS : ');READLN(N);
  DX:=L/(N-1);
  POS[1]:=0
  FOR I:=2 TO N DO
    POS[I]:=(I-1)*DX*10;
  END
PROCEDURE TIEMPODEIMPRESION;
BEGIN
  CLRSCR
  WRITELN('CUANTOS TIEMPOS SE IMPRIMIRA EL PERFIL ? (n) ');READLN(Q);
  WRITELN('CUALES SON ESTOS TIEMPOS ? :');
  FOR J:=1 TO Q DO
    READLN(PT[J]);
  TFIN:=PT[Q];
  END;
PROCEDURE OELT;
BEGIN
  CLRSCR;
  WRITE('DT ? : ');READLN(DT);
```

```

WHILE DT<=0 DO
BEGIN
WRITE(' DT : ');READLN(DT);
END;END;
PROCEDURE COEFICIENTEDEDIFUSION;
BEGIN
FOR I:=1 TO N DO
DIF[I]:=exp(-32000/(1.987*TEMP))*(0.07+(0.06*CP[I]));
END
PROCEDURE CALCULOFOURIER;
BEGIN
FOR I:=1 TO N DO
FO[I]:=(DIF[I]*DT)/(DX*DX);
END;
PROCEDURE MATRIDIAO;
BEGIN
V[1]:=CS;
B[1]:=1;
C[1]:=0;
D[1]:=CP[1];
FOR I:=2 TO N-1 DO
B[I]:=-(1/2)-(1/(2*FO[I]));
FOR I:=2 TO N-1 DO
C[I]:=1/2;
FOR I:=2 TO N-1 DO
A[I]:=1/2;
FOR I:=2 TO N-1 DO
D[I]:=CP[I]*((1/2)-FO[I]-(1/(2*FO[I])))+(FO[I]/2)*(CP[I+1]+CP[I-1]);
A[N]:=0;
B[N]:=1;
D[N]:=CINC
BETA[1]:=B[1];
GAMMA[1]:=D[1]/BETA[1];
FOR I:=2 TO N DO

```

```

BEGIN
BETA[I]:=B[I]-((A[I]*C[I-1])/BETA[I-1]);
GAMMA[I]:=D[I]- (A[I]*GAMMA[I-1])/BETA[I];
END;
V[N]:=GAMMA[N];
FOR K:=1 TO N-2 DO
BEGIN
I:=N-K;
V[I]:=GAMMA[I]-((C[I]*V[I+1])/BETA[I])
END
V[N]:=CINC;
END;
PROCEDURE ASIGNACION;
BEGIN
FOR I:=2 TO N DO
CP[I]:=V[I];
END
PROCEDURE GRABAR;
VAR NOMBRE: STRING[14];
F1:TEXT;
BEGIN
NOMBRE:='A:CICLO3.MOD';
ASSIGN(F1,NOMBRE);
APPEND(F1);
WRITELN(F1);
WRITELN(F1);
WRITELN(F1,' Tiempo al cual se calcula el perfil : ',T:8:5);
GetTime(hora,minuto,segundo,centesima);
WRITELN(F1,' SON LAS ',hora,':',minuto,':',segundo,':',centesima);
WRITELN(F1,' POSICION      % EN PESO DE C ');
FOR I:=1 TO N DO
WRITELN(F1,' ', POS[I]:3:3,' ',V[I]:10:10);
CLOSE(F1);
J:=J+1;

```

```
END;
BEGIN
CLRSR;
PRESENTACION;
LECTURADEDATOS;
FOR I:=2 TO N DO
CP[I]:=CINC;
TEMP:=1088.555556;
CS:=1.15;
DELT;
TIEMPDDEIMPRESION;
CLRSR;TEXTCOLOR(CYAN);GOTOXY(30,12);WRITE(' Procesando. No interrumpir ');
T:=0;J:=1;T:=T+DT;
TEXTCOLOR(WHITE);
WHILE T<=TFIN DO
BEGIN
IF (0<=T) AND (T<=1636.36362) THEN
BEGIN
TEMP:=(0.067901235*T)+1088.555556
END
ELSE
IF (1636.36362<T) AND (T<=19309.09072) THEN
BEGIN
TEMP:=1199.666667;
END;
IF (0<T) AND (T<=981.818172) THEN
BEGIN
CS:=1.15;
END
ELSE
IF (981.818172<T) AND (T<=1636.36362) THEN
BEGIN
CS:=(0.00024826389*T)+0.906250001
END
```

```
ELSE
IF (1636.36362<T) AND (T<=12109.09079) THEN
BEGIN
CS:=1.3125;
END
ELSE
IF (12109.09079<T) AND (T<=19309.09072) THEN
BEGIN
CS:=(-0.000041666666*T)+1.817045449;
END;
CP[1]:=CS;
COEFICIENTEDEDIFUSION;
CALCULOFOURIER;
MATRIDIAG;
IF ((T-(DT/2))<=PT[J]) AND (PT[J]<=(T+(DT/2))) THEN
BEGIN
GRABAR;
WRITELN;WRITELN;
WRITELN(' TIEMPO : ',T:8:5);
WRITELN(' POSICION      % EM PESO DE C ');
FOR I:=1 TO N DO
WRITELN(' ', POS[I]:3:3,' ',V[I]:10:10);
END;
ASIGNACION;
T:=T+DT;
END.
```

Interpolación lineal

```

PROGRAM INTERPOLACION_LINEAL;
USES CRT;
CONST
IOerr:BOOLEAN=FALSE;
VAR
FileName:STRING[225];
InFile, OutFile:TEXT;
Ch:CHAR
I, J, N, NumVarsCoefs, NumPuntos:INTEGER;
pos:ARRAY[1..40] OF REAL;
cf:ARRAY[1..40] OF REAL;
abscisa:ARRAY[1..40] OF REAL;
ordenada:ARRAY[1..40] OF REAL;
{$I-}{ "Desconectar" el paro del programa por error de I/O }
{$R+}{ "Conectar" la evaluaci\ '{o}n de los rangos en las variables }
{$I COMMON.001} (* procedures: IOcheck, GetOutputFile *)
BEGIN
CLRSKR;WRITELN;WRITELN;
REPEAT
WRITE(' Nombre del archivo para las abscisas y las ordenadas ? ');
READLN(FileName);
ASSIGN(InFile, FileName);
RESET(InFile);
IOcheck;
UNTIL NOT IOerr;
NumVarsCoefs:= 0;
WHILE NOT(EOF(InFile)) DO
BEGIN
NumVarsCoefs := Succ(NumVarsCoefs);
readln(InFile, pos[NumVarsCoefs], cf[NumVarsCoefs]);
IOcheck;
END;
END;

```

```

CLOSE(InFile);
WRITELN;WRITELN;
REPEAT
WRITE(' Nombre del Archivo para las abscisas cuya ordenada se
interpolar\ '{a} ? ');
READLN(FileName);
ASSIGN(InFile, FileName);
RESET(InFile);
IOCheck;
UNTIL NOT IOerr;
NumPuntos := 0;
WHILE NOT(EOF(InFile)) DO
BEGIN
NumPuntos := Succ(NumPuntos);
READLN(InFile, abscisa[NumPuntos]);
IOCheck
END;
CLOSE(InFile);
I:=1;
J:=1;
WHILE I<=NumVarsCoefs-1 DO
BEGIN
IF (pos[I]<abscisa[J]) AND (abscisa[J]<pos[I+1]) THEN
BEGIN
ordenada[J]:=cf[I]+((cf[I+1]-cf[I])/(pos[I+1]-pos[I]))*
(abscisa[J]-pos[I]);
J:=J+1
END
I:=I+1;
END;
GetOutputFile(OutFile, Ch);
FOR J:=1 TO NumPuntos-1 DO
BEGIN
WRITELN(OutFile, abscisa[J], ' ':5, ordenada[J]);

```

```
END;  
CLOSE(OutFile);  
Delay(5000)  
END.
```

Norma Euclidiana

```
PROGRAM NORMA_ERROR;
USES CRT;
CONST
IOerr: boolean = false; { Flags an I/O error }
VAR
FileName: String[255];
InFile, OutFile: TEXT;
Ch: CHAR;
I, J, NumVarsCoefs, NumPuntos: INTEGER;
abscisa, ordanalitica, ordenada: ARRAY[0..40] OF REAL;
POTENCIA, RESTA, SUMA: ARRAY[0..40] OF REAL;
norma, SUM: REAL;
{$I-} { "Desconectar" el paro del programa por error de I/O }
{$R+} { "Conectar" la evaluaci\ '{0}n de los rangos en las variables }
{$I COMMON.001} (* procedures: IOcheck, GetOutputFile *)
PROCEDURE GRABAR;
VAR NOMBRE: STRING[14];
F1: TEXT;
BEGIN
NOMBRE := 'A:ERROR.DAT';
ASSIGN(F1, NOMBRE);
APPEND(F1);
WRITELN(F1);
WRITELN(F1);
WRITELN(F1, ' ', norma);
CLOSE(F1);
END;
BEGIN
CLRSCR; WRITELN; WRITELN;
REPEAT
WRITE(' Nombre del archivo que contiene los valores interpolados ? ');
```

```
READLN(FileName);
ASSIGN(InFile, FileName);
RESET(InFile);
IOCheck;
UNTIL NOT IOerr;
NumVarsCoefs:= 0
WHILE NOT(EOF(InFile)) DO
BEGIN
NumVarsCoefs := Succ(NumVarsCoefs);
READLN(InFile, abscisa[NumVarsCoefs], ordenada[NumVarsCoefs]);
IOCheck
END
CLOSE(InFile);
WRITELN;WRITELN;
REPEAT
WRITE(' Nombre del Archivo que contiene los valores de las
ordenadas analiticas ? ');
READLN(FileName);
ASSIGN(InFile, FileName);
RESET(InFile);
IOCheck;
UNTIL NOT IOerr
NumPuntos := 0;
WHILE NOT(EOF(InFile)) DO
BEGIN
NumPuntos := Succ(NumPuntos);
READLN(InFile, ordanalitica[NumPuntos]);
IOCheck;
END;
CLOSE(InFile);
SUMA[0]:=0;
FOR J:=1 TO NumPuntos-1 DO
BEGIN
RESTA[J]:=ordenada[J]-ordanalitica[J];
```

```
POTENCIA[J]:=-RESTA[J]*RESTA[J];  
SUMA[J]:=-SUMA[J-1]+POTENCIA[J];  
END;  
norma:=SQR(SUMA[NumPuntos-1]);  
GRABAR;  
end.
```

Apéndice C

Ecuaciones para temperatura y concentración superficial

Tratamiento 1

- Temperatura

$$T = 1194.11111 \text{ K} \quad 0 \leq \text{tiempo} \leq 79200 \text{ s} \quad (\text{C.52})$$

$$T = 1183 \text{ K} \quad 79200 < \text{tiempo} \leq 126000 \text{ s} \quad (\text{C.53})$$

- Concentración superficial

$$CS = 1.25 \quad 0 < \text{tiempo} \leq 79200 \text{ s} \quad (\text{C.54})$$

$$CS = -2.08333333e-5 * \text{tiempo} + 2.9 \quad 79200 < \text{tiempo} \leq 100800 \text{ s} \quad (\text{C.55})$$

$$CS = -7.93650777e-6 * \text{tiempo} + 1.599999981 \quad 100800 < \text{tiempo} \leq 126000 \text{ s} \quad (\text{C.56})$$

Tratamiento 2

- Temperatura

$$T = 0.05050505 * \text{tiempo} + 1088.555556 \quad 0 \leq \text{tiempo} \leq 2199.999996 \text{ s} \quad (\text{C.57})$$

$$T = 1199.666667 \text{ K} \quad 2199.999996 < \text{tiempo} \leq 22159.998 \text{ s} \quad (\text{C.58})$$

$$T = -0.023602037 * \text{tiempo} + 1722.68776 \quad 22159.998 < \text{tiempo} \leq 25759.998 \text{ s} \quad (\text{C.59})$$

$$T = 1114.69933 \text{ K} \quad 25759.998 < \text{tiempo} \leq 28800 \text{ s} \quad (\text{C.60})$$

• Concentración superficial

$$CS = 1.81818183e-4 \cdot \text{tiempo} + 0.9 \quad 0 < \text{tiempo} \leq 2199.999996 \text{ s} \quad (\text{C.61})$$

$$CS = -3.81098055e-6 \cdot \text{tiempo} + 1.30838416 \quad 2199.999996 < \text{tiempo} \leq 8759.988 \text{ s} \quad (\text{C.62})$$

$$CS = 1.275 \quad 8759.988 < \text{tiempo} \leq 22159.998 \text{ s} \quad (\text{C.63})$$

$$CS = -5.5555555e-5 \cdot \text{tiempo} + 2.50611 \quad 22159.998 < \text{tiempo} \leq 25759.998 \text{ s} \quad (\text{C.64})$$

$$CS = 1.075 \quad 25759.998 < \text{tiempo} \leq 28800 \text{ s} \quad (\text{C.65})$$

Tratamiento 3

• Temperatura

$$T = 0.06790123 \cdot \text{tiempo} + 1088.555556 \quad 0 \leq \text{tiempo} \leq 1636.36362 \text{ s} \quad (\text{C.66})$$

$$T = 1199.666667 \text{ K} \quad 1636.36362 < \text{tiempo} \leq 19309.09072 \text{ s} \quad (\text{C.67})$$

• Concentración Superficial

$$CS = 1.15 \quad 0 < \text{tiempo} \leq 981.818172 \text{ s} \quad (\text{C.68})$$

$$CS = 2.4826389e-4 \cdot \text{tiempo} + 0.90625 \quad 981.818172 < \text{tiempo} \leq 1636.36362 \text{ s} \quad (\text{C.69})$$

$$CS = 1.3125 \quad 1636.36362 < \text{tiempo} \leq 12109.09079 \text{ s} \quad (\text{C.70})$$

$$CS = -4.1666666e-5 \cdot \text{tiempo} + 1.81704549 \quad 12109.09079 < \text{tiempo} \leq 19309.09072 \text{ s} \quad (\text{C.71})$$