Mecánica Computacional Vol 20. pp. 92 — 99 Compilado por Fernando G. Flores Córdoba, 30 de octubre - 2 de noviembre de 2001

ESTUDIO DE LA SOLIDIFICACIÓN DE ESTAÑO CONSIDERANDO PROPIEDADES VARIABLES

Rubén Ramírez, Marcela Cruchaga y Diego Celentano

Departamento de Ingeniería Mecánica Universidad de Santiago de Chile Av. Bdo. O'Higgins 3363 – Santiago – CHILE e-mail : mcruchag@lauca.usach.cl

RESUMEN

El presente trabajo tiene como finalidad el análisis numérico de la convección natural que se produce durante la solidificación de un metal puro en una cavidad rectangular cuyas paredes verticales se someten a diferentes temperaturas mientras que las horizontales se mantienen térmicamente aisladas. El estudio se realiza en forma bidimensional usando como material estaño líquido. La solución numérica de las ecuaciones de continuidad, cantidad de movimiento lineal y energía se obtiene en el contexto del método de elementos finitos. Para el problema propuesto se estudia la influencia que tiene sobre el flujo la variación de las propiedades térmicas con la temperatura así como también se compara el efecto que tiene la convección en la evolución de la curvatura del frente de cambio de fase. Los resultados obtenidos se comparan con mediciones experimentales y otras soluciones numéricas disponibles en la literatura.

ABSTRACT

The aim of the present work is the numerical analysis of the natural convection that develops during the solidification of a pure metal in a rectangular cavity whose vertical walls are subjected to different temperatures while the horizontal ones are thermally insulated. Two-dimensional conditions are assumed in the study using tin as a liquid material. The numerical solution of the continuity, linear momentum and energy equations is carried out in the context of the finite element method. For this problem, the influence of the temperature-dependent thermal properties on the flow as well as the effect of the convection over the evolution of the phase-change front is particularly analyzed. The obtained results are compared with experimental measurements and other numerical solutions available in the literature.

1. INTRODUCCIÓN

La solución de problemas de ingeniería mediante el uso de simulaciones computacionales es un procedimiento que hoy posee una gran relevancia debido a que es una herramienta que posibilita la comprensión y descripción de fenómenos físicos difíciles de analizar como lo es, por ejemplo, el caso de la solidificación de metales.

En particular, en el trabajo de Wolff y Viskanta (1988) se presenta el análisis experimental de la solidificación de estaño puro, cuyo punto de fusión es 231.9 °C, en una cavidad de 8.89 cm de ancho, 6.66 cm de alto y 12.6 cm de profundidad considerando un molde de vidrio Pirex de 0.7 cm de espesor. Las paredes horizontales fueron aisladas con Silox, material de baja conductividad térmica (0.02 W/m°C), y las paredes verticales fueron sometidas a una diferencia de temperatura mediante intercambiadores de calor. Los números de Rayleigh y de Stefan que caracterizan dicho ensayo así como las temperaturas impuestas en ambas paredes verticales durante la realización del experimento se indican en la Tabla 1. La medición de temperatura fue realizada mediante termopares con una precisión de ± 0.1 °C. Cabe destacar que estos mismos autores realizaron, para validar su experiencia, un estudio numérico basado en un modelo matemático desarrollado por Ramachandran (1982), el cual simula el cambio de fase utilizando la formulación de entalpía utilizando como método de cálculo el de diferencias

finitas. Más recientemente, Raw y Lee (1991) han realizado un análisis numérico de dicho problema utilizando el método de los elementos finitos basado en las funciones de líneas de corriente, vorticidad y entalpía.

En el presente estudio se analiza numéricamente el mencionado problema de solidificación de estaño puro mediante la metodología de elementos finitos descrita en [1]. Las ecuaciones completas de Navier-Stokes para flujo incompresible se presentan en la sección 2. La forma débil de dichas ecuaciones se obtiene a través de una formulación generalizada a contracorriente que permite igual orden de interpolación para las variables primitivas del problema: velocidad, presión y temperatura. Por otro lado, el efecto de cambio de fase se incluye mediante una formulación basada en la temperatura. En la sección 3 se discuten las soluciones numéricas obtenidas en este trabajo para el problema analizado. En particular, se consideran propiedades térmicas constantes y variables con la temperatura, se analiza también por separado la transferencia de calor por conducción y por conducción más convección natural producto del cambio de densidad que resulta del proceso de calentamiento y, además, se realiza un estudio del movimiento del frente sólido-líquido en cuanto a la velocidad de éste frente y del volumen solidificado en función del tiempo. Estos resultados se comparan con las mediciones experimentales de Wolff y Viskanta (1988) y las predicciones numéricas de estos últimos autores y de Raw y Lee (1991).

2. ECUACIONES DEL PROBLEMA

Las ecuaciones que gobiernan el problema de convección natural de un fluido Newtoneano incompresible con presencia de cambio de fase son [1]:

- ecuación de continuidad

$$\nabla \cdot \mathbf{v} = \mathbf{0}$$

- ecuación de cantidad de movimiento

$$\rho v + \rho (v \cdot \nabla) v + \nabla p - \nabla \cdot (2\mu \in) = \rho b$$

- ecuación de energía

$$\rho\left(c+L\frac{\partial f_{\mu}}{\partial T}\right)\left(\dot{T}+\nabla T\cdot v\right)=\nabla\cdot\left(k\nabla T\right)$$

donde v corresponde al campo vectorial de velocidades, ρ es la densidad, μ es la viscosidad dinámica, p es la presión, ∇ es el operador gradiente, ε es el tensor de velocidad de deformación del fluido definido por $\varepsilon = \frac{1}{2} (\nabla_x v + v_x \nabla) y$ b es la fuerza específica escrita de acuerdo a la aproximación de Boussinesq de la forma: b = g[1-\alpha(T-T_{REF})], siendo g la aceleración de gravedad, α el coeficiente volumétrico de expansión térmica, T es la temperatura y el subíndice REF indica un valor de referencia. Además, c es el calor especifico, L es el calor latente específico, k es el coeficiente de conductividad térmica y fpc es la función de cambio de fase que para un material puro se escribe como fpc = H(T-Tm), donde H es la función de Heaviside y Tm es la temperatura de cambio de fase.

3. EJEMPLO DE APLICACIÓN

El estudio de la situación física considerada en este trabajo corresponde a la descripción de la transferencia de calor y la mecánica de fluidos para la solidificación de estaño puro en una

cavidad rectangular [1-3]. Para el presente análisis se utilizan las mismas consideraciones que las de los trabajos desarrollados en [2] y [3]. Las condiciones de contorno térmicas que afectan a la cavidad son: temperatura impuesta en la pared izquierda y derecha, Th y Tc respectivamente, y superficies superiores e inferiores térmicamente aisladas. El estaño líquido se encuentra inicialmente en reposo a una temperatura de 233° C. La temperatura de cambio de fase es de Tm=231.9°C. Las condiciones de contorno para la velocidad es la de no-deslizamiento del material en contacto con las paredes. En la Figura 1 se pueden apreciar la geometría y las condiciones de contorno e iniciales del problema en estudio. En la Tabla 1, se muestran los parámetros de cada uno de los casos analizados. Cabe mencionar que para todos los casos estudiados se mantiene un paso de tiempo de 6 segundos y una malla de 32 x 32 elementos (dicha discretización espacio-temporal es similar a la usada en [2]).



Figura 1. Geometría, condiciones de contorno e iniciales.

Caso	Th	Tc	Ra	Ste
A	233 °C	226 °C	1.59*10 ⁵	2.69*10-2
В	234 °C	226 °C	3.01*105	2.69*10-2
С	233 °C	229 °C	1.59*10 ⁵	1.32*10-2

Tabla 1. Parámetros de los casos analizados.

La posición del frente de cambio de fase para el caso A (ver Tabla 1) se muestra en la Figura 2. Los resultados obtenidos de las simulaciones numéricas dejan de manifiesto la diferencia entre las curvas correspondientes a los casos de propiedades constantes [2] y variables [3] con la temperatura. Ambas se comparan, a su vez, con las curvas simuladas por Raw y Lee (1991). Si bien para el primer tiempo mostrado (t=0.077h=277.2s) ambos resultados son similares a la predicción de la referencia mencionada, las curvas obtenidas con propiedades constantes se van paulatinamente alejando de la correspondiente a propiedades variables para tiempos posteriores representando, por tanto, un proceso de solidificación más lento. Este hecho se debe, fundamentalmente, a la menor difusividad térmica existente para el caso de propiedades constantes. El mismo fenómeno se observa en las curvas de evolución de los volúmenes líquido y sólido de estaño para el caso A mostradas en la Figura 3 en donde, además, se consideraron nulos los efectos convectivos. Para cualquier tiempo del proceso, se ve que la curva de volumen sólido calculada considerando propiedades variables está por encima de la correspondiente a propiedades constantes eque el tiempo

para el cual se solidifica la mitad de la celda (punto en que se encuentran las curvas de volúmenes líquido y sólido) es menor para el caso de propiedades variables. Es importante mencionar que se presenta una situación similar a la descrita cuando también se incluye la convección natural en el análisis.



Figura 2. Posición del frente de cambio de fase, para el caso A (Th=233°C y Tc=226°C), considerando propiedades constantes (- - - -) y variables (----). Comparación con el estudio numérico de Raw y Lee (1991) (o o o o) para t=0.077h, t=0.165h, t=0.529h, t=0.799h y t=0.93h (de derecha a izquierda).



Figura 3. Comparación del volumen de estaño líquido (curva descendente) y de sólido (curva ascendente) para propiedades constantes (- - - -) y variables (----) en función del tiempo para el caso A (Th=233°C y Tc=226°C) considerando sólo conducción.

La Figura 4 muestra una comparación de los resultados obtenidos para los casos de conducción pura y conducción más convección como mecanismos de transferencia de calor. Se aprecia que para la parte media y superior de la celda los efectos convectivos toman una mayor importancia que se hace evidente en la curvatura de las isotermas en esas zonas. Debido a que las paredes inferiores se suponen adiabáticas, el frente de cambio de fase tiende a ser normal a ellas. En la parte inferior se ve que ambas simulaciones arrojan resultados similares poniendo de manifiesto la poca relevancia de los efectos convectivos en dicha región.

Los casos A y B (ver Tabla 1) se representan respectivamente en las Figuras 5 y 6 graficando las evoluciones de la posición del frente de cambio de fase sólido-líquido obtenidas en este estudio y comparándolas con los datos experimentales publicados por Wolff y Viskanta (1988) y con los resultados del estudio numérico realizado por Raw y Lee (1991). En dichas figuras se puede apreciar que para los primeros instantes la transferencia de calor se realiza preferentemente por conducción manifestándose el efecto de convección natural a medida que avanza el tiempo. La curvatura de la interfaz sólido-líquido se debe exclusivamente al efecto de la convección natural. Dicho fenómeno es captado por el estudio presente mostrando, sin embargo, un proceso más lento en comparación con los datos experimentales. Cabe mencionar que las simulaciones computacionales de los autores antes mencionados muestran modelaciones similares a las obtenidas en este trabajo.

Además, de las Figuras 5 y 6 se observa que el comportamiento del material es altamente sensible a la diferencia de temperatura impuesta en las paredes. En particular, para tiempos avanzados del análisis se presenta un mejor ajuste de las curvas numéricas con las obtenidas experimentalmente cuando dicha diferencia de temperatura entre las paredes de la cavidad es

mayor (caso B). Esto se debe a que las fluctuaciones de la temperatura impuesta existentes durante el desarrollo experimental tienen una menor incidencia en este último caso.



Figura 4. Posición del frente de cambio de fase considerando propiedades variables y los mecanismos de transferencia de calor de solamente por conducción (- - -) y por conducción más convección (-----) para el caso A (Th=233°C y Tc=226°C) para t=0.077h, t=0.165h, t=0.529h, t=0.799h y t=0.93h (de derecha a izquierda).



Figura 5. Posición del frente de cambio de fase para el caso A (Th=233°C y Tc=226°C) para los tiempos t=0.077h, t=0.165h, t=0.529h, t=0.799h y t=0.93h (de derecha a izquierda).



Figura 6. Posición del frente de cambio de fase para el caso B (Th=234°C y Tc=226°C) para los tiempos t=0.077h, t=0.165h, t=0.529h, t=1.146h y t=1.462h (de derecha a izquierda).

estudio experimental; Wolf y Viskanta (1988) ----- estudio numérico; Raw y Lee (1991) - estudio presente

2. Construction of the process of the state of the sta

96

En general, se observa sólo un buen ajuste cualitativo de los resultados numéricos con los experimentales. En este sentido, un aspecto importante a tener en cuenta es el efecto de la inercia térmica que se produce en el ensayo experimental [2] ya que la temperatura de la pared fría, tal como se aprecia en las curvas de las Figuras 5 y 6, demora en alcanzar su condición final Tc aproximadamente 2 minutos. En las simulaciones, por el contrario, dicha condición se supuso desde el inicio del proceso lo que provoca que las predicciones para los primeros tiempos estén desfasadas hacia la izquierda. Otras posibles causas de discrepancia entre la simulación y la experiencia pueden deberse, tal como se discute en [2,3], al aislamiento imperfecto de la pared inferior, la separación del material en la pared superior por efecto de la contracción térmica provocando de esta manera un cambio en las condiciones de contorno de la velocidad en dicha pared, la dificultad de mantener temperaturas impuestas constantes en las paredes verticales y el bajo grado de exactitud de los termopares utilizados. La Figura 7 muestra la evolución del frente de cambio de fase para el caso C (ver Tabla 1) comparando los resultados obtenidos con los datos experimentales y numéricos de Wolff y Viskanta (1988) y con las predicciones surgidas del estudio realizado por Raw y Lee (1991). Se puede apreciar que tales predicciones numéricas son similares hasta el tiempo t=0.529h a partir del cual se produce una cierta dispersión entre ellas. Debe notarse que la curvatura pronunciada presente en los resultados numéricos de Wolff y Viskanta (1988) para tiempos avanzados del proceso (atribuible al método de cálculo empleado) no concuerda con los datos experimentales los cuales se encuentran mejor descritos por las predicciones del presente trabajo y las publicadas por Raw y Lee (1991), estas últimas bastante similares entre sí. Una vez más, el ajuste de los resultados numéricos con los experimentales es sólo cualitativamente razonable pudiendo la diferencia entre ambos ser atribuida a los mismos factores discutidos anteriormente.



Figura 7. Posición del frente de cambio de fase para el caso C (Th=233°C y Tc=229°C) para los tiempos t=0.077h, t=0.165h, t=0.529h, t=1.462h y t=1.896h (de derecha a izquierda).



La evolución del campo de velocidad para el caso C se grafica en la Figura 8. Se aprecia Claramente el desarrollo de vortices por efecto de la convección natural. En los primeros instantes se presenta un único vórtice de gran tamaño en la zona central que, a medida que transcurre el tiempo, se desplaza hacia la zona superior izquierda. Para los tiempos finales del análisis aparecen algunos vórtices de menor tamaño en la región inferior izquierda. En la Tabla 2 se muestran las velocidades máximas para los mismos tiempos de las Figuras 7 y 8. Puede notarse una tendencia inicial creciente y una decreciente a partir de t=0.529h aproximadamente debido a la reducción de la cavidad líquida producto de la solidificación.



Tiempo (horas)	Velocidad máxima (m/s)
0.077	0.008425
0.165	0.009117
0.529	0.010153
1.462	0.008558
1.896	0.008009

Tabla 2. Valor de las velocidades máximas para los tiempos seleccionados para el caso C (Th=233°C y Tc=229°C).

4. CONCLUSIONES

Se ha presentado en este trabajo un estudio de la solidificación de estaño puro en una cavidad rectangular. En la simulación numérica del problema se resolvieron las ecuaciones completas de Navier-Stokes para flujo incompresible en el contexto del método de elementos finitos. Se ha observado un buen ajuste cualitativo de los resultados obtenidos con la técnica descrita anteriormente con los datos experimentales apreciándose también una buena descripción del efecto de la convección natural durante el proceso de solidificación. Por otro lado, el hecho de considerar propiedades constantes con la temperatura y solamente el mecanismo de transferencia de calor por conducción provoca un notorio desfase en las simulaciones reflejando un proceso más lento y poco representativo del problema en estudio. Por último, si bien no se encuentran disponibles mediciones experimentales de velocidad, la distribución del campo de velocidades obtenida numéricamente es aceptable teniendo en cuenta el rango de los números de Rayleigh estudiados.

5. REFERENCIAS

- 1. M. Cruchaga y D. Celentano: "A finite element coupled flow formulation for phasechange problems." Int. J. Numer. Meth. Fluids, vol. 34, pp. 279-305 (2000).
- 2. F. Wolff y R. Viskanta: "Solidification of a pure metal at a vertical wall in the presence of liquid superheat", Int. J. Heat Mass Transfer, Vol. 31, pp. 1735-1744 (1988).
- 3. W. Y. Raw y S. L. Lee: "Application of weighting function scheme on convectionconduction phase change problems", *Int. J. Heat Mass Transfer*, Vol. 34, pp. 1503-1513 (1991).