

UNA FORMULACIÓN PARA FLUJO INCOMPRESIBLE CON EFECTOS DE CAMBIO DE FASE

Marcela Cruchaga y Diego Celentano
Departamento de Investigaciones Científicas y Tecnológicas
Departamento de Ingeniería Mecánica
Universidad de Santiago de Chile
Av. Lib. Bdo. O'Higgins 3363 - Santiago de Chile - CHILE
e-mail: diego@ferrari.usach.cl

RESUMEN

En este trabajo se presenta una formulación para flujo incompresible que considera efectos de cambio de fase. Dicha formulación también tiene en cuenta la convección natural, propiedades de los materiales dependientes de la temperatura y un modelo de cambio de fase generalizado. En el contexto del método de elementos finitos, se resuelven las ecuaciones de Navier-Stokes incluyendo la del balance de energía en forma acoplada usando la técnica conocida como "operador generalizado a contracorriente". Esta metodología permite el uso de igual orden de interpolación para las variables del problema de flujo y, además, no requiere de las técnicas tradicionales de penalización para ajustar la condición de incompresibilidad. En el problema térmico, los términos no lineales debidos al cambio de fase se describen con un algoritmo basado en temperaturas que provee estabilidad y convergencia a la solución numérica. La resolución algebraica del problema acoplado se realiza a través de una técnica alternada tal que en la solución de cada problema se usa un esquema incremental-iterativo cuyos criterios de convergencia se escriben en función de los respectivos vectores de residuos. Por último, se verifica el comportamiento de esta formulación en un problema de solidificación de una cavidad.

ABSTRACT

An incompressible flow formulation considering phase-change effects is presented in this work. This formulation accounts for natural convection, temperature-dependent material properties and it includes a generalized phase-change model. In the context of the finite element method, the Navier-Stokes equations together with the balance energy equation are solved applying a "generalized streamline operator" technique. This methodology enables the use of equal order interpolation for the variables of the flow problem. Moreover, it does not require the classical penalization procedure in order to adjust the incompressibility condition. In the thermal problem, the non linear terms due to phase-change are described with a temperature-based algorithm that provides convergence and stability to the numerical solution. The algebraic solution procedure of the coupled problem is attempted via a staggered technique such that an incremental-iterative scheme is used for the solution of each problem where the convergence criteria are written in terms of the respective residual vectors. Finally, this formulation is checked in the analysis of a solidification problem in a cavity.

INTRODUCCIÓN

En diversos problemas de ingeniería aparece la necesidad de considerar flujos con efectos térmicos que involucran el fenómeno de cambio de fase. Entre las aplicaciones más importantes se puede citar el proceso de solidificación inmediatamente después del llenado en la industria de la fundición donde el control de la transferencia de calor y las características del flujo son factores determinantes para lograr piezas de buena

calidad. En este tipo de problemas, se considera que el movimiento del fluido se origina por gradientes de temperaturas en presencia de la gravedad dando lugar al fenómeno de convección natural^[1-6,13].

En el contexto del método de elementos finitos, es posible encontrar diversas técnicas para describir el problema de flujos térmicamente acoplados con efectos de cambio de fase. Ellas pueden clasificarse en dos grandes grupos: a) métodos de avance del frente de cambio de fase^[1-3] y b) métodos de dominio fijo^[4-7,13]. Muchas de las ventajas y desventajas de ambas metodologías han sido discutidas en [10]. Con respecto a los métodos de dominio fijo es importante destacar, sin embargo, la posibilidad de tratar cambios de fase no isotérmicos y su extensión natural a casos tridimensionales.

Dentro del grupo correspondiente a los métodos de dominio fijo, en este trabajo se presenta una formulación alternativa para flujo incompresible que incluye efectos generalizados de cambio de fase. Se describen las ecuaciones del problema, su forma discretizada y se comenta en forma sucinta la estrategia numérica de solución. Por último, se presenta el análisis de un problema de solidificación de una cavidad con el fin de evaluar los alcances de la presente formulación.

ECUACIONES DEL PROBLEMA

Las ecuaciones que describen el comportamiento de un fluido incompresible que puede experimentar cambios de fase son las siguientes^[1-13]:

- ecuación de balance de la cantidad de movimiento:

$$\rho \dot{\mathbf{v}} + \rho(\mathbf{v} \cdot \nabla) \mathbf{v} + \nabla p - \nabla \cdot (2\mu \boldsymbol{\varepsilon}) = \rho \mathbf{b} \quad \text{en } \Omega \times Y \quad (1)$$

- ecuación de continuidad:

$$\nabla \cdot \mathbf{v} = 0 \quad \text{en } \Omega \times Y \quad (2)$$

- ecuación de la energía:

$$\rho \left(c + L \frac{\partial f_{pc}}{\partial T} \right) (\dot{T} + \nabla T \cdot \mathbf{v}) = \nabla \cdot (k \nabla T) + \rho r \quad \text{en } \Omega \times Y \quad (3)$$

junto con las condiciones de contorno,

$$\mathbf{v} = \bar{\mathbf{v}} \quad \text{en } \Gamma_v \times Y \quad (4)$$

$$(-p\mathbf{I} + 2\mu \boldsymbol{\varepsilon}) \cdot \mathbf{n} = \bar{\mathbf{t}} \quad \text{en } \Gamma_\sigma \times Y \quad (5)$$

$$T = \bar{T} \quad \text{en } \Gamma_T \times Y \quad (6)$$

$$\mathbf{q} \cdot \mathbf{n} = -\bar{q} - q^* \quad \text{en } \Gamma_q \times Y \quad (7)$$

con las condiciones iniciales,

$$\mathbf{v} \Big|_{t=0} = \mathbf{v}_0 \quad \text{en } \Omega \quad (8)$$

$$T \Big|_{t=0} = T_0 \quad \text{en } \Omega \quad (9)$$

donde Ω es el dominio de análisis, Γ su contorno y Y es el intervalo de tiempo de interés. En estas ecuaciones, ρ es la densidad, \mathbf{v} es el vector de velocidad, p es la presión, μ es la viscosidad dinámica, $\boldsymbol{\varepsilon}$ es el tensor velocidad de deformación, ∇ es el operador gradiente, el punto sobre las variables indica derivada temporal y $\mathbf{b} = \mathbf{g} [1 - \alpha(T - T_{ref})]$ es la fuerza de volumen escrita teniendo en cuenta la aproximación de Boussinesq^[1-6], donde \mathbf{g} es la aceleración de la gravedad, α es el coeficiente de dilatación térmica, T es la temperatura y el subíndice "ref" indica un valor de referencia. Además, c es el calor específico, L es el calor latente específico,

k es el coeficiente de conductividad, r es la fuente específica de calor y $f_{pc} = \bar{f}_{pc}(T)$ es la función de cambio de fase definida de acuerdo a la naturaleza del mismo^[10-12]. Es importante destacar que μ , c y k pueden ser dependientes de la temperatura^[13], que se han despreciado los términos energéticos derivados de efectos mecánicos y que, además, se ha supuesto válida la ley de Fourier isotrópica para describir el fenómeno de conducción de calor^[1-13]. En las ecuaciones (4)-(7), Γ_v , Γ_σ , Γ_T y Γ_q son las partes de Γ (n es la normal saliente unitaria al mismo) en donde se prescriben, respectivamente, la velocidad \bar{V} , el vector de tracciones \bar{t} , la temperatura \bar{T} y el flujo normal de calor \bar{q} ^[8-13]. Adicionalmente, q^* es el flujo normal de calor debido al efecto de convección-radiación con el ambiente que rodea a Ω que responde a la ley de Newton: $q^* = -h(T - T_{env})$ donde h es el coeficiente de convección-radiación (dependiente de la temperatura en un caso general) y T_{env} es la temperatura de dicho ambiente. Debe notarse que se cumplen las siguientes condiciones: $\Gamma_v \cup \Gamma_\sigma = \Gamma$, $\Gamma_v \cap \Gamma_\sigma = \emptyset$ y $\Gamma_T \cup \Gamma_q = \Gamma$, $\Gamma_T \cap \Gamma_q = \emptyset$ ^[8-13].

FORMULACIÓN DISCRETIZADA

En el contexto del método de elementos finitos^[14], las ecuaciones espacialmente discretizadas del problema son^[8-13],

$$F_v - M\dot{V} - K_v V = 0 \quad (10)$$

$$F_T - (C + C_{pc})\dot{T} - (K + K_{ad} + K_{ad-pc})T = 0 \quad (11)$$

que corresponden, respectivamente, a las ecuaciones de flujo (cantidad de movimiento y continuidad) y energía considerando las condiciones de contorno descritas anteriormente. En el sistema acoplado formado por las ecuaciones (10)-(11), F_v es el vector de fuerzas, M es la matriz de masa, K_v es la matriz de convección-difusión, V es el vector de incógnitas de flujo (velocidad y presión) nodales^[8,9], F_T es el vector de flujos externos de calor, C es la matriz de capacidad, C_{pc} es la matriz de cambio de fase, K es la matriz de conductividad, K_{ad} es la matriz advectiva, K_{ad-pc} es la matriz advectiva de cambio de fase y T es el vector de temperaturas nodales^[10-12].

Las expresiones elementales de estas matrices y vectores se encuentran en [8,10]. En la ecuación (10) se aplica la técnica del operador generalizado a contracorriente^[8,9] que permite igual orden de interpolación para los campos de velocidad y presión y, además, no requiere de métodos adicionales para satisfacer la condición de incompresibilidad. Por otro lado, en la ecuación (11) se usa un algoritmo basado en la temperatura que provee estabilidad y convergencia a la solución numérica^[10-12].

La discretización temporal de las ecuaciones (10)-(11) se realiza por medio de la conocida regla generalizada del punto medio^[14]. Por último, el problema acoplado se resuelve utilizando una técnica de solución alternada tal que la solución de cada ecuación se obtiene a través de un esquema incremental-iterativo cuyos criterios de convergencia se escriben en función de los correspondientes vectores de residuos^[8-13].

EJEMPLO DE APLICACIÓN

Se analiza un ejemplo de convección natural de un flujo confinado en una cavidad cuadrada con efectos de cambio de fase. Este problema también ha sido estudiado en [1-3] con la finalidad de evaluar la influencia del cambio de fase en las características del flujo. El material considerado es aluminio puro cuyas propiedades se encuentran en la Tabla I^[1-3]. Para este material, el cambio de fase se produce en forma isotérmica y, por lo tanto, la función de cambio de fase se expresa en este caso como: $f_{pc} = H(T - T_m)$ donde H es la función de Heaviside (función escalón) y T_m es la temperatura de cambio de fase.

La pared vertical izquierda de la cavidad está sometida a una condición de contorno de convección-radiación con un ambiente a 25.0 °C y $h=0.18084 \text{ kcal/m}^2 \text{ s } ^\circ\text{C}$ ^[1-3]. Al resto de las paredes se las considera térmicamente

aisladas. En todas ellas se supone, además, que las componentes x e y de v son nulas. Inicialmente, el aluminio se encuentra en estado líquido con una temperatura uniforme de $860.0\text{ }^{\circ}\text{C}$, valor que coincide con el adoptado para la temperatura de referencia.

Los números de Rayleigh considerados en el análisis ($Ra = g\alpha(T_0 - T_m)L_{ch}^3\rho^2c / \mu k$, siendo L_{ch} la longitud característica del problema que en este caso es coincidente con el lado de la cavidad) son: 0 , 10^4 , 10^5 , 10^6 y 10^7 . Estos valores se obtienen para un g dado variando la magnitud de L_{ch} o, en forma equivalente, modificando g para una L_{ch} fija ^[1-3]. En este trabajo, se adoptó $L_{ch} = 1.0\text{ m}$ y g igual a 0 , 0.00013 , 0.0013 , 0.013 y 0.013 m/s^2 para los distintos Ra mencionados, respectivamente.

conductividad (k)	$0.0548\text{ kcal/ms}^{\circ}\text{C}$
calor específico (c)	$0.2526\text{ kcal/kg}^{\circ}\text{C}$
calor latente (L)	95.0 kcal/kg
densidad (ρ)	2650.0 kg/m^3
viscosidad dinámica (μ)	$3.233\ 10^{-3}\text{ kg/ms}$
coeficiente de dilatación térmica (α)	$3.84\ 10^{-5}\text{ }1/^{\circ}\text{C}$
temperatura de cambio de fase (T_m)	$660.0\text{ }^{\circ}\text{C}$

Tabla I: propiedades del aluminio.

En la simulación, se adoptó una malla uniforme de 20×20 elementos isoparamétricos de cuatro nodos con un paso de tiempo de $\Delta t = 122.15\text{ s}$ para $Ra = 0$, 10^4 , 10^5 y 10^6 y de 30.5375 s ($\Delta t/4$) para el caso $Ra = 10^7$. Los cuatro primeros casos mencionados también han sido estudiados en [1-3] mientras que el quinto constituye un aspecto novedoso de este trabajo.

En las Figuras 1 y 2 se presentan, respectivamente, los campos de velocidades y temperaturas para cuatro tiempos diferentes del análisis con $Ra = 10^5$. Los resultados para las mismas variables para los casos $Ra = 10^6$ y $Ra = 10^7$ se muestran en las Figuras 3-4 y 5-6. Es posible notar las variaciones en las características del flujo a medida que transcurre el tiempo destacando, en particular, la formación de vórtices secundarios (la escala de los vectores no es la misma en estas Figuras). Se aprecia claramente la curvatura de las isoterms debido al efecto de la convección natural. También puede observarse que el avance de la posición del frente de cambio de fase es mayor en la base que en la parte superior de la cavidad.

En la Tabla II se comparan los tiempos de solidificación para distintos Ra obtenidos con la presente formulación con los valores publicados por McDaniel y Zabarás ^[2]. Se observa un buen ajuste entre ambos resultados. Con respecto al tiempo correspondiente al caso de ausencia de convección ($Ra = 0$ o problema de Stefan ^[1-3]), el tiempo de solidificación aumenta para $Ra = 10^4$ y $Ra = 10^5$ y decrece para $Ra = 10^6$ y $Ra = 10^7$ (nótese que esta tendencia es levemente diferente a la publicada en [2] ya que en ese trabajo se encontró un menor tiempo de solidificación para el caso $Ra = 10^5$ que para $Ra = 0$). La separación del flujo que ocurre a Ra altos afecta la distribución de temperaturas para tiempos cercanos al de solidificación y efectivamente acelera el movimiento de la interface en su zona superior produciendo, entonces, una disminución del tiempo de solidificación.

Las velocidades máximas para los casos $Ra = 10^5$, $Ra = 10^6$ y $Ra = 10^7$ para diferentes tiempos se muestran en la Tabla III comparando los resultados de la formulación propuesta con los presentados en [2]. Una vez más, dichas formulaciones arrojan resultados similares.

En la Figura 7 se realiza un estudio comparativo de la posición del frente de cambio de fase a diferentes tiempos para los cinco Ra mencionados anteriormente todos ellos obtenidos con la formulación presentada en este trabajo. En esta Figura queda en evidencia la gran influencia que tiene este parámetro en las condiciones de transferencia de calor y en las características del flujo.

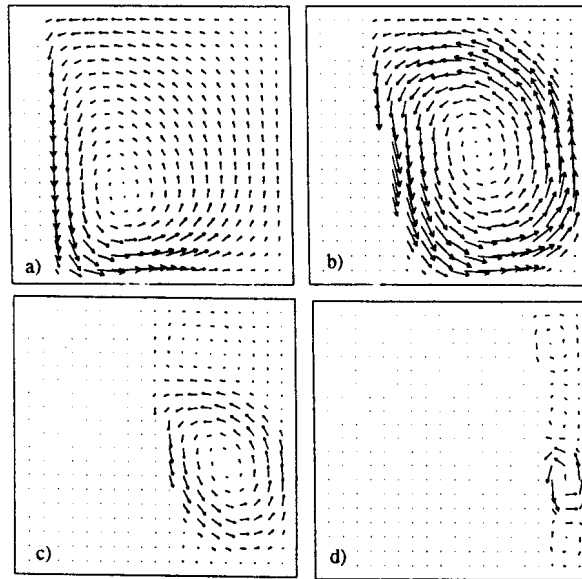


Figura 1: campos de velocidad para $Ra=10^5$. a) $t=610$ s, b) $t=1832.25$ s, c) $t=4275.25$ s y d) $t=7329.0$ s.

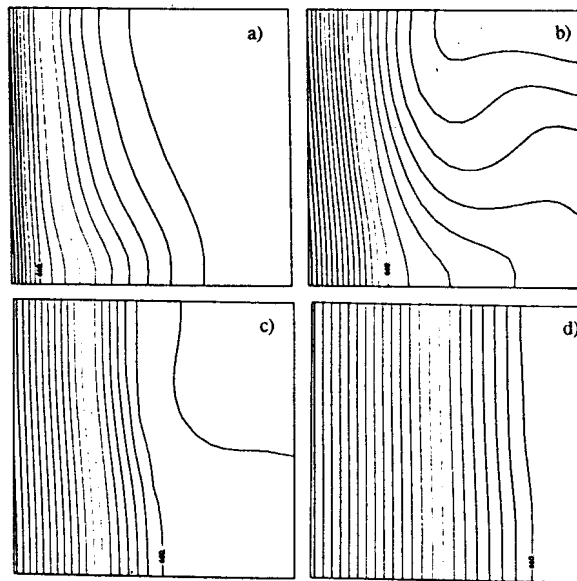


Figura 2: campos de temperatura para $Ra=10^5$. a) $t=610$ s, b) $t=1832.25$ s, c) $t=4275.25$ s y d) $t=7329.0$ s (las isothermas están separadas 20°C).

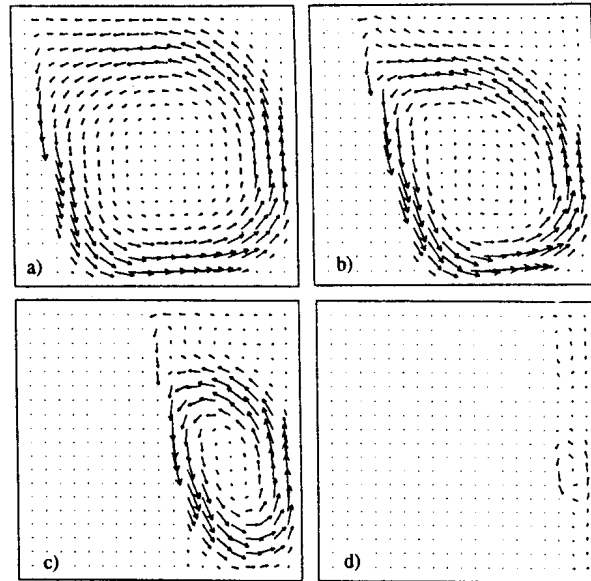


Figura 3: campos de velocidad para $Ra=10^6$. a) $t=610$ s, b) $t=1832.25$ s, c) $t=4275.25$ s y d) $t=7329.0$ s.

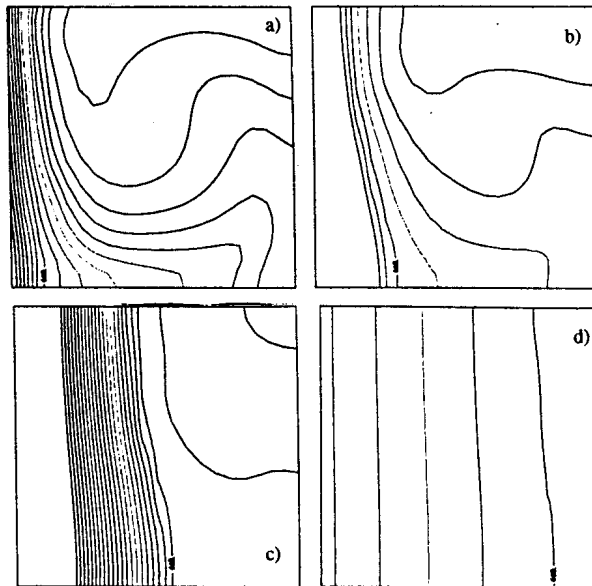


Figura 4: campos de temperatura para $Ra=10^6$. a) $t=610$ s, b) $t=1832.25$ s, c) $t=4275.25$ s y d) $t=7329.0$ s (las isothermas están separadas 20°C para los casos a) y b), 10°C para el c) y 100°C para el d)).

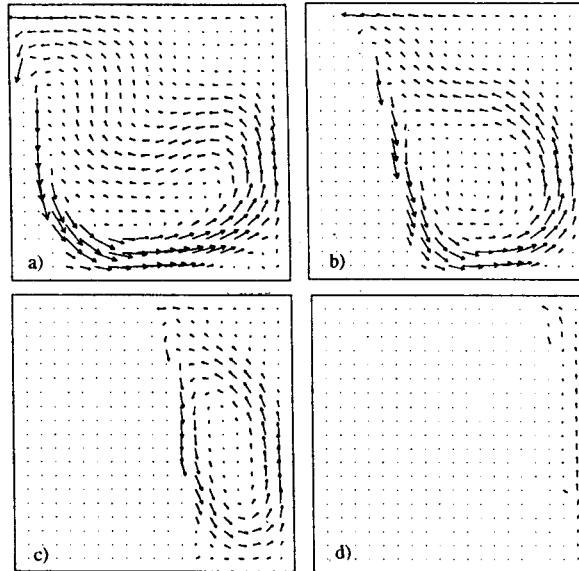


Figura 5: campos de velocidad para $Ra=10^7$. a) $t=610$ s, b) $t=1832.25$ s, c) $t=4275.25$ s y d) $t=7329.0$ s.

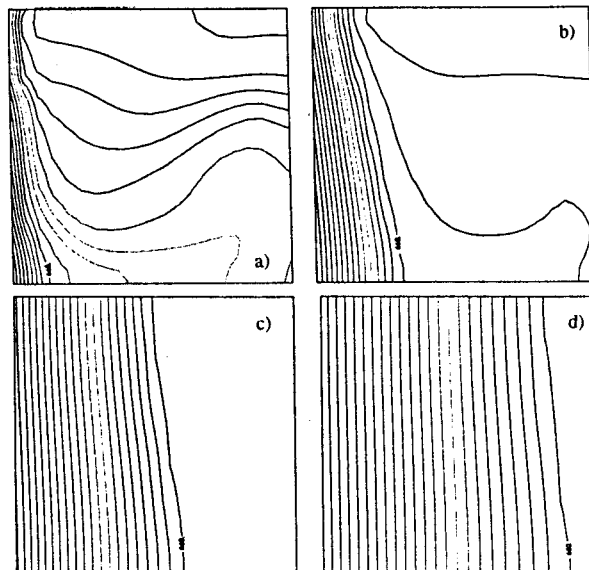


Figura 6: campos de temperatura para $Ra=10^7$. a) $t=610$ s, b) $t=1832.25$ s, c) $t=4275$ s y d) $t=7329.0$ s (las isothermas están separadas 20°C).

Caso	Este trabajo	McDaniel and Zabarás ^[2]
Ra=0	10193.43	10260.60
Ra=10 ⁴	10269.55	10346.10
Ra=10 ⁵	10216.95	10175.51
Ra=10 ⁶	10139.65	9930.79
Ra=10 ⁷	9676.62	

Tabla II: tiempos de solidificación (s) para distintos Ra.

Caso	Este trabajo	McDaniel and Zabarás ^[2]
Ra=10 ⁵	t= 610.75	0.00205
	t=1832.25	0.00209
	t=4275.25	0.00133
	t=7329.00	0.00015
Ra=10 ⁶	t= 610.75	0.00685
	t=1832.25	0.00387
	t=4275.25	0.00190
	t=7329.00	0.00018
Ra=10 ⁷	t= 610.75	0.01353
	t=1832.25	0.00619
	t=4275.25	0.00208
	t=7329.00	0.00049

Tabla III: velocidades máximas (m/s) para Ra=10⁵, Ra=10⁶ y Ra=10⁷ para distintos tiempos (s).

Por último, la Figura 8 muestra la posición del frente de cambio de fase a distintos tiempos para Ra=10⁵ y Ra=10⁶ contrastando los valores obtenidos en este trabajo con los presentados en [2]. Si bien ambas metodologías utilizan algoritmos diferentes para el seguimiento del frente, los resultados dados por las mismas presentan una buena concordancia.

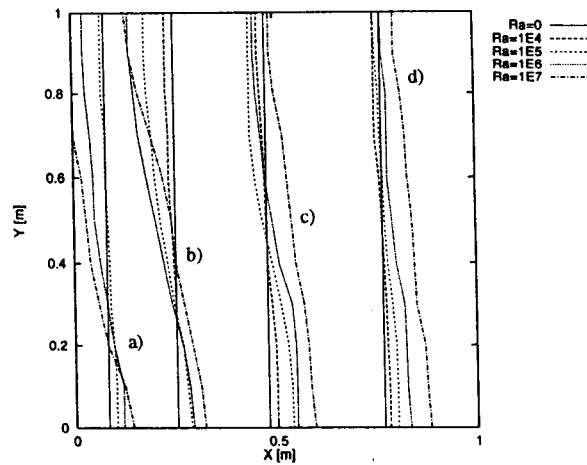


Figura 7: posición del frente de cambio de fase para los tiempos: a) t=610 s, b) t=1832.25 s, c) t=4275.25 s y d) t=7329.0 s; para Ra=0, 10⁴, 10⁵, 10⁶ y 10⁷.

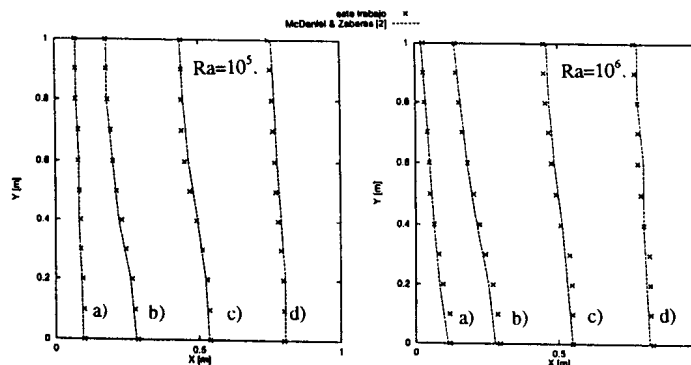


Figura 8: posición del frente de cambio de fase para los tiempos: a) $t=610$ s, b) $t=1832.25$ s, c) $t=4275.25$ s y d) $t=7329.0$ s; para $Ra=10^5$ y 10^6 .

CONCLUSIONES

Se ha presentado en este trabajo una formulación para flujo incompresible con efectos de cambio de fase. La misma se ha aplicado al análisis de un problema de solidificación de aluminio puro en una cavidad. Los resultados obtenidos con esta formulación han sido satisfactoriamente validados con otra solución existente en la literatura y además, se ha estudiado el comportamiento del flujo a números de Rayleigh elevados. Por último, es importante destacar la estabilidad y convergencia numérica de las soluciones presentadas en este trabajo.

REFERENCIAS

- 1) Yoo J. and Rubinsky R.: "A Finite Element Method for the Study of Solidification Processes in the Presence of Natural Convection", *International Journal for Numerical Methods in Engineering*, Vol. 23, pp. 1785-1805 (1986).
- 2) McDaniel D. and Zabarás N.: "A Least-Squares Front-Tracking Finite Element Method Analysis of Phase Change with Natural Convection", *International Journal for Numerical Methods in Engineering*, Vol. 37, pp. 2755-2777 (1994).
- 3) Zabarás N. and Nguyen T.: "Control of the Freezing Interface Morphology in Solidification Processes in the Presence of Natural Convection", *International Journal for Numerical Methods in Engineering*, Vol. 38, pp. 1555-1578 (1995).
- 4) Voller V., Cross M. and Markatos N.: "An Enthalpy Method for Convection/Diffusion Phase Change", *International Journal for Numerical Methods in Engineering*, Vol. 24, pp. 271-284 (1987).
- 5) Brent A., Voller V. and Reid K.: "Enthalpy-Porosity Technique for Modeling Convection-Diffusion Phase Change: Application to the Melting of a Pure Metal", *Numerical Heat Transfer*, Vol. 13, pp. 297-318 (1988).
- 6) Dantzig J.: "Modelling Liquid-Solid Phase-Changes with Melt Convection", *International Journal for Numerical Methods in Engineering*, Vol. 28, pp. 1769-1785 (1989).
- 7) Reddy M. and Reddy J.: "Numerical Simulation of Forming Processes Using a Coupled Fluid Flow and Heat Transfer Model", *International Journal for Numerical Methods in Engineering*, Vol. 35, pp. 807-833 (1992).

- 8) Cruchaga M.: "Un modelo de flujo incompresible para problemas con contorno móvil", *tesis doctoral*, Universidad Politécnica de Cataluña, España. Junio 1996.
- 9) Cruchaga M. and Oñate E.: "A Finite Element Formulation for Incompressible Flow Problems Using a Generalized Streamline Operator", *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, Vol. 143, pp. 49-67 (1997).
- 10) Celentano D., Oñate E. and Oller S.: "A Temperature-Based Formulation for Finite Element Analysis of Generalized Phase-Change Problems", *International Journal for Numerical Methods in Engineering*, Vol. 37, pp. 3441-3465 (1994).
- 11) Celentano D. and Pérez E.: "A Phase-Change Formulation Including General Latent Heat Effects", *International Journal of Numerical Methods for Heat and Fluid Flow*, Vol. 6, Issue 8, pp. 71-79 (1996).
- 12) Celentano D.: "Un modelo numérico para el análisis térmico del proceso de laminado continuo de chapas", *Anales del ENIEF 95: Noveno Congreso sobre Métodos Numéricos y sus Aplicaciones*, pp. 3235-334. Bariloche, Argentina (1995).
- 13) Cruchaga M. and Celentano D.: "A Thermally Coupled Incompressible Flow Formulation with Phase-Change Effects", *Proceedings of the Tenth International Conference on Numerical Methods in Thermal Problems*. Swansea, U.K. (1997).
- 14) Zienkiewicz O. and Taylor R.: *The Finite Element Method*, Fourth Edition, McGraw-Hill Book Company (1989).