

SOLUCION NUMERICA DEL PROBLEMA DE CONDUCCION DE CALOR CON CAMBIO DE FASE MEDIANTE METODOS DE DOMINIO FIJO

Víctor D. Fachinotti*, Alberto Cardona† y Alfredo E. Huespe‡

Grupo de Tecnología Mecánica, INTEC
CONICET-Universidad Nacional del Litoral
Güemes 3450, 3000, Santa Fe, Argentina

Resumen

Se desarrollan dos modelos de dominio fijo para conducción de calor con cambio de fase con vista a su aplicación para simular el proceso de colada de aceros: uno de capacitancia efectiva evaluada por regularización espacial y una variante del modelo basado en la temperatura. En ambos modelos, la discretización espacial es conseguida utilizando elementos finitos triangulares lineales, mientras que para la discretización temporal se recurre al esquema retro-Euler en diferencias finitas. Se dedica especial atención a la solución de la ecuación no lineal que rige el problema aplicando métodos incremental-iterativos eficientes.

Abstract

We develop two fixed domain models for heat conduction with phase change to be applied in steel casting simulation: an effective capacitance model obtained by spatial regularization and a temperature-based one. Both models are spatially discretized using linear triangle finite elements, while a backward-Euler finite difference scheme is used for time discretization. Special emphasis is posed on solving the governing non-linear equation by efficient incremental-iterative methods.

1 Introducción

Existen numerosos campos tecnológicos que dedican gran atención al fenómeno de cambio de fase, entre otros, metalurgia, seguridad nuclear, energía solar y mecánica de suelos. Puesto que la solución analítica está disponible en un número limitado de situaciones ideales, para problemas tecnológicos generales se impone la aplicación de métodos numéricos, entre los que se distinguen dos grandes grupos: los métodos de seguimiento del contorno y los de dominio fijo. Los primeros se restringen habitualmente a problemas unidimensionales u otros en los que la interfase posee una topología sencilla, no admiten múltiples interfases y requieren una solución inicial. Los métodos de dominio fijo se valen de una formulación débil que contempla implícitamente la singularidad provocada por el frente móvil, cuya posición es determinada a posteriori a partir del campo de temperaturas. Entre estos se cuentan los modelos de capacitancia, los basados en la temperatura, los de fuente ficticia y los del índice de congelamiento. Existen numerosas revisiones del estado del arte de la solución numérica de problemas de cambio de fase [1-7], a las que remitimos para una reseña general.

*Pasante UNL.

†Profesor UNL e Investigador CONICET.

‡Profesional CONICET.

En virtud de su versatilidad y siguiendo la corriente actual, centraremos nuestra atención en los métodos de grilla fija y, particularmente, en variantes de los modelos de capacitancia y basados en la temperatura.

En los modelos de capacitancia, los efectos del cambio de fase (absorción o liberación de calor latente en la interfase) se incluyen en la definición de la capacidad calorífica "aparente" del material. La ecuación de gobierno conserva la forma de la ecuación de Fourier para conducción de calor en una sola fase. Por lo tanto, su implementación en los códigos existentes es inmediata, siendo ésta la causa principal de su popularidad. Su mayor desventaja es la propensión a subestimar los efectos del calor latente e inclusive ignorarlos si no es lo suficientemente amplio el intervalo de solidificación o fina la subdivisión temporal.

El método de capacidad "efectiva" (MCE) intenta superar ese inconveniente mediante regularización temporal o espacial. No obstante, no se pueden emitir juicios acerca de la conservatividad de tales esquemas.

El método basado en la temperatura (MBT), propuesto originalmente por Crivelli e Idelsohn [8], partiendo de una formulación en entalpía, recupera la temperatura como variable primaria. Una característica distintiva del modelo es la integración discontinua en los elementos bajo cambio de fase.

Un párrafo aparte está dedicado a la solución del sistema discreto de ecuaciones no lineales resultante. A la ventaja de usar un algoritmo incremental-iterativo tipo Newton-Raphson en virtud de su implementación directa y su velocidad de convergencia, a menudo se opone la dificultad de calcular la matriz jacobiana tangente en forma exacta. Salvar ese obstáculo es uno de los objetivos fundamentales del presente trabajo.

2 Planteo del problema

Sea la ecuación de conducción de calor

$$\frac{\partial \mathcal{H}}{\partial t} - \nabla \cdot (\mathbf{k} \cdot \nabla T) = Q \quad \mathbf{x} \in \Omega, t \in \Upsilon \quad (1)$$

expresada en términos de la entalpía \mathcal{H} y la temperatura T , siendo \mathbf{k} la conductividad y Q la fuente interna de calor, sujeta a la condición inicial:

$$T(\mathbf{x}, t = 0) = T_0(\mathbf{x}) \quad \text{en } \Omega \quad (2)$$

y a las siguientes condiciones de contorno:

$$\begin{aligned} T &= T_w && \text{en } \partial\Omega_T \times \Upsilon \\ (\mathbf{k} \cdot \nabla T) \cdot \mathbf{n} &= q && \text{en } \partial\Omega_q \times \Upsilon \\ (\mathbf{k} \cdot \nabla T) \cdot \mathbf{n} &= h(T_\infty - T) && \text{en } \partial\Omega_c \times \Upsilon \end{aligned} \quad (3)$$

donde T_w y q son la temperatura y el flujo prescritos, h es el coeficiente de convección y T_∞ es la temperatura de régimen del medio circundante.

Al presentarse múltiples fases dentro del dominio, debe verificarse (1) dentro de cada una de ellas y se originan condiciones de borde adicionales que establecen el balance energético en la(s) interfase(s) Γ , conocidas como *condiciones de Stefan*. Así, para el caso de cambio de fase isotérmico a temperatura T_m , tenemos:

$$\begin{aligned} T_s &= T_l = T_m && \text{en } \Gamma \times \Upsilon \\ (\mathbf{k}_s \cdot \nabla T_s) \cdot \mathbf{n}_s + (\mathbf{k}_l \cdot \nabla T_l) \cdot \mathbf{n}_l - \rho \mathcal{L} \dot{s} \cdot \mathbf{n}_l &= 0 && \text{en } \Gamma \times \Upsilon \end{aligned} \quad (4)$$

siendo $\mathbf{n}_s = -\mathbf{n}_l$ el versor normal a Γ exterior a Ω_s , $\rho \mathcal{L}$ el calor latente y \dot{s} la velocidad de la interfase.

Análogamente, cuando el cambio de fase no es isotérmico y aparece una zona pastosa o "mushy" para el rango comprendido entre las temperaturas de solidus T_{sol} y liquidus T_{liq} , la condición de balance en las interfases sólido-mushy Γ^{sm} y mushy-líquido Γ^{ml} da lugar a las condiciones de Stefan correspondientes.

La ecuación de gobierno (1) junto a la condición inicial (2) y las condiciones de borde estándar (3) más las condiciones de Stefan, constituyen un problema de valores iniciales y de contorno conocido como *problema de Stefan*.

2.1 Formulación entálpica

Se define la entalpía por:

$$\mathcal{H} = \int_{T_{ref}}^T \rho c(T) dT + \rho \mathcal{L} f_l(T) = \mathcal{H}^c + \mathcal{H}^L \quad (5)$$

o sea, la suma de los contenidos de calor sensible \mathcal{H}^c y de calor latente \mathcal{H}^L ; ρc es la capacidad calorífica del material y f_l es la fracción de volumen líquido local, dada por la función de Heaviside $H(T - T_m)$ para cambio de fase isotérmico o por

$$f_l = \begin{cases} 0 & T \leq T_{sol} \\ 0 < f^*(T) \leq 1 & T_{sol} < T \leq T_{liq} \\ 1 & T > T_{liq} \end{cases} \quad (6)$$

en caso contrario.

De la definición (5), se deduce una propiedad denominada *capacidad calorífica aparente* que incluye los efectos del calor latente:

$$\rho c_{app} = \frac{d\mathcal{H}}{dT} = \rho c + \rho \mathcal{L} \frac{df_l}{dT} \quad (7)$$

Al introducir (7) en (1), recuperamos una ecuación de igual forma que la conocida *ecuación de Fourier* de conducción de calor cuando no se presenta cambio de fase:

$$\rho c_{app} \frac{\partial T}{\partial t} - \nabla \cdot (\mathbf{k} \cdot \nabla T) = Q \quad \text{en } \Omega \times \Upsilon \quad (8)$$

Nótese que para problemas de cambio de fase isotérmico, ρc_{app} toma la forma de la función impulso para la temperatura de solidificación, obligando a introducir un rango mushy ficticio, cuya longitud debería mantenerse pequeña.

En procura de subsanar los inconvenientes ocasionados por la evaluación directa de ρc_{app} , ésta es regularizada espacialmente [9] dando lugar a la *capacidad calorífica efectiva*

$$\rho c^* = \frac{\nabla \mathcal{H} \cdot \nabla T}{\|\nabla T\|^2} \quad (9)$$

Alternativamente, la relación (7) permite reescribir (8) como:

$$\rho c \frac{\partial T}{\partial t} + \rho \mathcal{L} \frac{df_l}{dt} - \nabla \cdot (\mathbf{k} \cdot \nabla T) = Q \quad \text{en } \Omega \times \Upsilon \quad (10)$$

que es la ecuación gobernante en caso de que se aplique el MBT.

2.2 Forma débil discreta

Los métodos de dominio fijo se basan en la forma débil del problema de Stefan, en la cual los términos sobre Γ se cancelan entre sí (empleando el teorema de transporte de Reynolds). Al

usar elementos finitos, el campo de temperaturas resulta aproximado por una combinación lineal de funciones de forma $N_i(\mathbf{x})$:

$$T(\mathbf{x}, t) \approx \sum_{i=1}^n N_i(\mathbf{x})T_i(t) \quad \text{en } \Omega \times \Upsilon \quad (11)$$

siendo T_i las temperaturas en los n nodos de la malla que representa el dominio. Si además aplicamos el método de Galerkin (ponderación mediante las funciones de forma), se obtiene como expresión débil y semidiscreta del problema de Stefan

$$\text{MCE :} \quad \mathbf{C}^* \dot{\mathbf{T}} + \mathbf{K} \mathbf{T} = \mathbf{F} \quad (12)$$

$$\text{MBT :} \quad \mathbf{C} \dot{\mathbf{T}} + \mathbf{K} \mathbf{T} + \dot{\mathbf{L}} = \mathbf{F} \quad (13)$$

$$C_{ij} = \int_{\Omega} \rho c N_i N_j d\Omega$$

$$C_{ij}^* = \int_{\Omega} \rho c^* N_i N_j d\Omega$$

$$K_{ij} = \int_{\Omega} \nabla N_i (\mathbf{k} \cdot \nabla N_j) d\Omega + \int_{\partial\Omega_c} h N_i N_j d\Gamma$$

$$\dot{L}_i = \int_{\Omega} N_i \rho \mathcal{L} f_i d\Omega$$

$$F_i = \int_{\Omega} N_i Q d\Omega + \int_{\partial\Omega_q} N_i q d\Gamma + \int_{\partial\Omega_c} N_i h T_{\infty} d\Gamma$$

donde \mathbf{C} (\mathbf{C}^*) y \mathbf{K} son las *matrices de capacitancia (efectiva) y conductividad*, respectivamente. \mathbf{F} es el *vector de cargas*, \mathbf{T} es el vector que contiene las temperaturas nodales y $\dot{\mathbf{T}}$ el vector de derivadas temporales de la temperatura evaluadas en los nodos.

Finalmente, para la discretización temporal se recurre al esquema retro-Euler, obteniéndose

$$\text{MCE :} \quad \Psi_{n+1} = (\mathbf{C}_{n+1}^* + \mathbf{K}_{n+1} \Delta t) \mathbf{T}_{n+1} - \mathbf{C}_{n+1}^* \mathbf{T}_n - \mathbf{F}_{n+1} \Delta t = \mathbf{0} \quad (14)$$

$$\text{MBT :} \quad \Psi_{n+1} = (\mathbf{C}_{n+1} + \mathbf{K}_{n+1} \Delta t) \mathbf{T}_{n+1} - \mathbf{C}_{n+1} \mathbf{T}_n - \mathbf{F}_{n+1} \Delta t + \mathbf{L}_{n+1} - \mathbf{L}_n = \mathbf{0} \quad (15)$$

donde el subíndice denota el instante de evaluación, ya sea t_n o t_{n+1} , y $\Delta t = t_{n+1} - t_n$.

El esquema de retro-Euler ha sido proclamado por varios autores como el más favorable entre los esquemas de un paso [3, 6, 10, 11] para el problema que nos ocupa.

3 Solución del problema de Stefan bidimensional

Se emplearán *elementos finitos triangulares lineales*. Además, en adelante asumiremos las siguientes hipótesis simplificativas: (i) La conductividad y la fuente interna de calor son independientes de la temperatura. (ii) Las condiciones de borde estándar no varían con el tiempo.

Las matrices y vectores globales que aparecen en (12) o (13) se obtendrán por ensamble de los correspondientes arreglos elementales. No nos detendremos en el cálculo de \mathbf{K} y \mathbf{F} sujetos a las hipótesis adoptadas, por cuanto la bibliografía clásica de elementos finitos, por ejemplo [12], ha dado suficiente cuenta de ello.

3.1 Método de capacitancia efectiva

Al resolver la ecuación no lineal (14), se ha observado la conveniencia de aglutinar la matriz de capacitancia [3, 13], lo que trae ventajas adicionales en términos de costo computacional. Para ello, se recurre a la fórmula de integración numérica de Newton-Cotes tomando como puntos de muestreo los nodos del elemento:

$$C_{ij}^{e*} = \int_{\Omega^e} \rho c^* N_i N_j d\Omega \approx \sum_{k=1}^3 \rho c_k^* N_i(x_k, y_k) N_j(x_k, y_k) \int_{\Omega^e} N_k d\Omega = \rho c^{*e} \frac{\Delta^e}{3} \delta_{ij} \quad (16)$$

donde Δ^e es el área del elemento y ρc^{*e} es la capacidad efectiva dentro del elemento, constante en virtud de (9) (asumiendo \mathcal{H} interpolada de igual modo que T).

3.1.1 Solución de la ecuación no lineal

La aplicación del método de Newton-Raphson supone aproximaciones sucesivas a (14) usando un desarrollo en series de Taylor:

$$\Psi_{n+1}^{(i)} \approx \Psi_{n+1}^{(i-1)} + \frac{\partial \Psi}{\partial \mathbf{T}} \Big|_{n+1}^{(i-1)} \Delta \mathbf{T}_{n+1}^{(i)} = \mathbf{0} \quad (17)$$

donde i denota la iteración considerada y

$$\frac{\partial \Psi}{\partial \mathbf{T}} \Big|_{n+1}^{(i-1)} = [\mathbf{C}_{n+1}^{*(i-1)} + \mathbf{K} \Delta t] + \frac{\partial \mathbf{C}^*}{\partial \mathbf{T}} \Big|_{n+1}^{(i-1)} \cdot (\mathbf{T}_{n+1}^{(i-1)} - \mathbf{T}_n) \quad (18)$$

es la matriz jacobiana tangente. Teniendo en cuenta la diagonalización de \mathbf{C}^* (16), el segundo sumando resulta de ensamblar la matriz:

$$\left[\frac{\partial C_{ij}^{*e}}{\partial T_k} \Delta T_j \right]_{n+1} = \left[\frac{\partial \rho c^{*e}}{\partial T_k} \Delta T_i \right]_{n+1} \frac{\Delta^e}{3} \quad (19)$$

con $\partial(\rho c^*)/\partial T_k$ calculada a partir de la regularización (9), esto es:

$$\frac{\partial \rho c^*}{\partial T_k} = (\rho c_{appk} - 2\rho c^*) \frac{\nabla T \cdot \nabla N_k}{\|\nabla T\|^2} + \frac{\nabla \mathcal{H} \cdot \nabla N_k}{\|\nabla T\|^2} \quad (20)$$

siendo ρc_{appk} la capacidad aparente en el nodo k dada por (7).

El proceso llega a su fin cuando el residuo $\Psi_{n+1}^{(i)}$ medido con alguna norma conveniente no supera un valor pequeño estipulado como tolerancia.

3.2 Método basado en la temperatura

A diferencia de trabajos anteriores usando integración discontinua [8, 14, 15], recurriremos aquí a la integración analítica exacta.

En un elemento triangular lineal e de vértices 1, 2, y 3, las funciones de forma coinciden con las coordenadas de área, definidas por

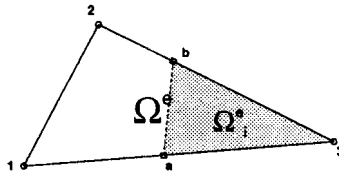
$$\begin{bmatrix} 1 \\ x \\ y \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 1 & 1 & 1 \\ x_1 & x_2 & x_3 \\ y_1 & y_2 & y_3 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \lambda_1 \\ \lambda_2 \\ \lambda_3 \end{bmatrix} \quad \text{en } \Omega^e$$

$$\mathbf{X} = \mathbf{A}\mathbf{\Lambda} \quad (21)$$

y cuyas propiedades [12] permiten escribir

$$\mathbf{I}_0 = \int_{\Omega^e} N^e d\Omega = \int_{\Omega^e} \mathbf{\Lambda} d\Omega = \begin{bmatrix} 1 \\ 1 \\ 1 \end{bmatrix} \frac{\Delta^e}{3}$$

$$\mathbf{I}_1 = \int_{\Omega^e} N^e N^{eT} d\Omega = \int_{\Omega^e} \mathbf{\Lambda} \mathbf{\Lambda}^T d\Omega = \begin{bmatrix} 2 & 1 & 1 \\ 1 & 2 & 1 \\ 1 & 1 & 2 \end{bmatrix} \frac{\Delta^e}{12}$$

Figura 1: Subdominio $\Omega_i^e \subset \Omega^e$.

Ahora, sea Ω_i^e un subdominio triangular dentro del elemento e (fig. 1). Entonces:

$$\mathbf{I}_0^i = \int_{\Omega_i^e} \mathbf{N}^e d\Omega = \mathbf{A}^{-1} \mathbf{A}_i \int_{\Omega_i^e} \Lambda_i d\Omega = \mathbf{A}^{-1} \mathbf{A}_i \begin{bmatrix} 1 \\ 1 \\ 1 \end{bmatrix} \frac{\Delta_i^e}{3}$$

$$\mathbf{I}_1^i = \int_{\Omega_i^e} \mathbf{N}^e \mathbf{N}^{eT} d\Omega = \mathbf{A}^{-1} \mathbf{A}_i \int_{\Omega_i^e} \Lambda_i \Lambda_i^T d\Omega (\mathbf{A}^{-1} \mathbf{A}_i)^T = \mathbf{A}^{-1} \mathbf{A}_i \begin{bmatrix} 2 & 1 & 1 \\ 1 & 2 & 1 \\ 1 & 1 & 2 \end{bmatrix} (\mathbf{A}^{-1} \mathbf{A}_i)^T \frac{\Delta_i^e}{12}$$

con el subíndice i denotando evaluación en $\Omega_i^e \subset \Omega^e$.

En el desarrollo siguiente se supondrá que la capacidad calorífica es constante en cada fase. Esta hipótesis no representa una restricción importante debido a que la no linealidad del problema de Stefan se debe primordialmente a los efectos del calor latente.

Solidificación isotérmica Para elementos totalmente inmersos en alguna de las fases, tenemos simplemente:

$$\mathbf{C}^e = \rho c_i \mathbf{I}_1 \quad i = s, l \quad (22)$$

$$\mathbf{L}^e = \begin{cases} \rho \mathcal{L} \mathbf{I}_0 & \text{Fase líquida} \\ \mathbf{0} & \text{Fase sólida} \end{cases} \quad (23)$$

Si el frente de solidificación interesa al elemento, quedan definidos en el mismo un subdominio sólido Ω_s^e y uno líquido Ω_l^e , alguno de los cuales resultará triangular. Según sea el caso, se tiene:

$$\left. \begin{aligned} \mathbf{C}^e &= \rho c_s \mathbf{I}_1 + (\rho c_l - \rho c_s) \mathbf{I}_1^i \\ \mathbf{L}^e &= \rho \mathcal{L} \mathbf{I}_0^i \end{aligned} \right\} \text{Subregión triangular líquida} \quad (24)$$

$$\left. \begin{aligned} \mathbf{C}^e &= \rho c_l \mathbf{I}_1 + (\rho c_s - \rho c_l) \mathbf{I}_1^i \\ \mathbf{L}^e &= \rho \mathcal{L} (\mathbf{I}_0 - \mathbf{I}_0^i) \end{aligned} \right\} \text{Subregión triangular sólida} \quad (25)$$

Solidificación no isotérmica En la fig. 2 se observan todas las configuraciones posibles de los elementos del dominio Ω cuando el cambio de fase no es isotérmico.

La evaluación de la matriz de capacitancia elemental \mathbf{C}^e sigue las mismas consideraciones que en la sección anterior,

$$\mathbf{C}^e = \begin{cases} \rho c_i \mathbf{I}_1 & i = s, l, m & \text{Casos 1, 2 y 3} \\ \rho c_m \mathbf{I}_1 + (\rho c_l - \rho c_m) \mathbf{I}_1^i & & \text{Caso 4} \\ \rho c_l \mathbf{I}_1 + (\rho c_m - \rho c_l) \mathbf{I}_1^m & & \text{Caso 5} \\ \rho c_m \mathbf{I}_1 + (\rho c_s - \rho c_m) \mathbf{I}_1^s & & \text{Caso 6} \\ \rho c_s \mathbf{I}_1 + (\rho c_m - \rho c_s) \mathbf{I}_1^m & & \text{Caso 7} \\ \rho c_m \mathbf{I}_1 + (\rho c_s - \rho c_m) \mathbf{I}_1^s + (\rho c_l - \rho c_m) \mathbf{I}_1^i & & \text{Caso 8} \\ \rho c_s \mathbf{I}_1 + (\rho c_l - \rho c_m) \mathbf{I}_1^l + (\rho c_m - \rho c_s) \mathbf{I}_1^{ml} & & \text{Caso 9} \\ \rho c_l \mathbf{I}_1 + (\rho c_s - \rho c_m) \mathbf{I}_1^s + (\rho c_m - \rho c_l) \mathbf{I}_1^{sm} & & \text{Caso 10} \end{cases} \quad (26)$$

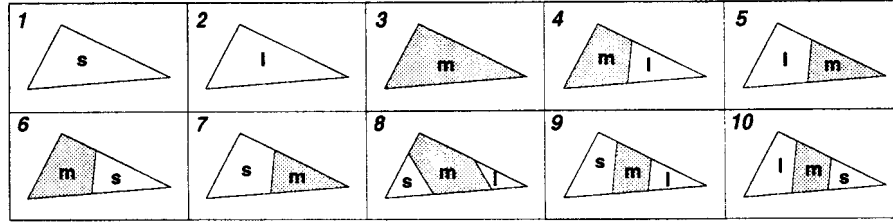


Figura 2: Configuraciones posibles de los elementos para el caso de cambio de fase no isotérmico.

con el índice ml (sm) refiriendo al triángulo $\Omega_m^e \cup \Omega_l^e$ ($\Omega_s^e \cup \Omega_m^e$). Supongamos f_l lineal dentro del intervalo de solidificación:

$$f_l = \frac{T - T_{sol}}{T_{liq} - T_{sol}} \quad T_{sol} < T < T_{liq} \quad (27)$$

lo que equivale a admitir una liberación uniforme del calor latente en la zona mushy. Luego:

$$\mathbf{L}^e = \begin{cases} \mathbf{0} & \text{Caso 1} \\ \rho \mathcal{L} \mathbf{I}_0 & \text{Caso 2} \\ \rho \mathcal{L} \mathbf{I}_2 & \text{Caso 3} \\ \rho \mathcal{L} (\mathbf{I}_2 + \mathbf{I}_0^i - \mathbf{I}_2^i) & \text{Caso 4} \\ \rho \mathcal{L} (\mathbf{I}_0 - \mathbf{I}_0^m + \mathbf{I}_2^m) & \text{Caso 5} \\ \rho \mathcal{L} (\mathbf{I}_2 - \mathbf{I}_2^i) & \text{Caso 6} \\ \rho \mathcal{L} \mathbf{I}_2^m & \text{Caso 7} \\ \rho \mathcal{L} (\mathbf{I}_2 + \mathbf{I}_0^i - \mathbf{I}_2^i - \mathbf{I}_2^s) & \text{Caso 8} \\ \rho \mathcal{L} (\mathbf{I}_0^i - \mathbf{I}_2^i + \mathbf{I}_2^{ml}) & \text{Caso 9} \\ \rho \mathcal{L} (\mathbf{I}_0 - \mathbf{I}_0^{sm} - \mathbf{I}_2^s + \mathbf{I}_2^{sm}) & \text{Caso 10} \end{cases} \quad (28)$$

donde:

$$\mathbf{I}_2 = \int_{\Omega^e} f_l \mathbf{N}^e d\Omega = \frac{1}{T_{liq} - T_{sol}} \mathbf{I}_1 \mathbf{T}^e - \frac{T_{sol}}{T_{liq} - T_{sol}} \mathbf{I}_0$$

$$\mathbf{I}_2^i = \int_{\Omega_i^e} f_l \mathbf{N}^e d\Omega = \frac{1}{T_{liq} - T_{sol}} \mathbf{I}_1^i \mathbf{T}^e - \frac{T_{sol}}{T_{liq} - T_{sol}} \mathbf{I}_0^i$$

3.2.1 Solución iterativa

El jacobiano tangente toma la forma:

$$\frac{\partial \Psi}{\partial \mathbf{T}} \Big|_{n+1}^{(i-1)} = \left[\mathbf{C}_{n+1}^{(i-1)} + \mathbf{K} \Delta t \right] + \frac{\partial \mathbf{C}}{\partial \mathbf{T}} \Big|_{n+1}^{(i-1)} \cdot (\mathbf{T}_{n+1}^{(i-1)} - \mathbf{T}_n) + \frac{\partial \mathbf{L}}{\partial \mathbf{T}} \Big|_{n+1}^{(i-1)} \quad (29)$$

En este trabajo se despreciará la contribución de la capacitancia, justificado en la mayoría de los problemas de cambio de fase por el hecho de que la no linealidad de los coeficientes es prácticamente insignificante frente a la que introduce el calor latente. Por lo tanto, sólo se calculará $\partial \mathbf{L} / \partial \mathbf{T}$, cuyo tratamiento diferirá según la naturaleza del cambio de fase analizado.

Solidificación isotérmica Cuando el cambio de fase es isotérmico, df_l/dT toma la forma de la delta de Dirac. Consideremos el caso isotérmico como el límite del caso no isotérmico cuando el espesor de la zona mushy tiende a anularse [16]. Luego, sea una franja pastosa ficticia Ω_m^{ict} de

espesor ε extendida a lo largo del frente de cambio de fase $\Gamma^e \equiv \overline{ab}$, transformada en el dominio rectangular $-1 \leq \xi \leq 1$, $-\varepsilon/2 \leq \eta \leq \varepsilon/2$, estando el eje ξ ubicado sobre \overline{ab} , con origen en su punto medio. Entonces,

$$\begin{aligned} \frac{\partial \mathbf{L}_i^e}{\partial \mathbf{T}_j} &= \rho \mathcal{L} \int_{\Omega^e} \frac{df_i}{dT} N_i N_j d\Omega = \rho \mathcal{L} \lim_{\varepsilon \rightarrow 0} \int_{-\varepsilon/2}^{\varepsilon/2} \int_{-1}^1 \frac{df_i^{fict}}{dT} N_i(\xi, \eta) N_j(\xi, \eta) \det(J) d\xi d\eta = \\ &= \frac{\rho \mathcal{L} |\overline{ab}|}{2 \|\nabla T\|} \int_{-1}^1 N_i(\xi, 0) N_j(\xi, 0) d\xi \end{aligned} \quad (30)$$

donde f_i^{fict} es la fracción líquida en Ω_m^{fict} dada por (27).

Solidificación no isotérmica En este caso, tenemos:

$$\frac{\partial \mathbf{L}^e}{\partial \mathbf{T}} = \int_{\Omega^e} \rho \mathcal{L} \frac{df_i}{dT} \mathbf{N}^e \mathbf{N}^{eT} d\Omega = \frac{\rho \mathcal{L}}{T_{liq} - T_{sol}} \int_{\Omega_m^e} \mathbf{N}^e \mathbf{N}^{eT} d\Omega \quad (31)$$

de donde:

$$\frac{\partial \mathbf{L}^e}{\partial \mathbf{T}} = \begin{cases} \mathbf{0} & \text{Casos 1 y 2} \\ \frac{\rho \mathcal{L}}{T_{liq} - T_{sol}} \mathbf{I}_1 & \text{Caso 3} \\ \frac{\rho \mathcal{L}}{T_{liq} - T_{sol}} (\mathbf{I}_1 + \mathbf{I}_1^I) & \text{Caso 4} \\ \frac{\rho \mathcal{L}}{T_{liq} - T_{sol}} \mathbf{I}_1^m & \text{Casos 5 y 7} \\ \frac{\rho \mathcal{L}}{T_{liq} - T_{sol}} (\mathbf{I}_1 - \mathbf{I}_1^s) & \text{Caso 6} \\ \frac{\rho \mathcal{L}}{T_{liq} - T_{sol}} (\mathbf{I}_1 - \mathbf{I}_1^s - \mathbf{I}_1^I) & \text{Caso 8} \\ \frac{\rho \mathcal{L}}{T_{liq} - T_{sol}} (\mathbf{I}_1^m - \mathbf{I}_1^I) & \text{Caso 9} \\ \frac{\rho \mathcal{L}}{T_{liq} - T_{sol}} (\mathbf{I}_1^{sm} - \mathbf{I}_1^s) & \text{Caso 10} \end{cases} \quad (32)$$

3.3 Aplicación

Sea la sección transversal de un lingote de acero dentro del horno de recalentamiento [1]. Dado que presenta doble simetría geométrica y física, el sistema es representado en sólo una cuarta parte (fig. 3a) usando una malla rectangular uniforme de $2 \times 10 \times 20$ elementos triangulares. Como datos complementarios se tienen: $T_m = 1500^\circ\text{C}$ (solidificación isotérmica), $\rho \mathcal{L} = 1.89 \times 10^6 \text{ kJ/m}^3$, $k = 30 \text{ W/(mK)}$ y $\rho c = 5.4 \times 10^3 \text{ kJ/(m}^3\text{K)}$, constantes; para aplicar el MCE, se adopta un rango de solidificación de longitud $T_{liq} - T_{sol} = 2^\circ\text{C}$.

La convergencia del proceso iterativo se evalúa en términos de la norma L_2 del residuo Ψ , estableciéndose una tolerancia de 10^{-6} .

La fig. 3b muestra la posición del frente de cambio de fase para los instantes $t = 600 \text{ seg}$, $t = 2400 \text{ seg}$ y $t = 5400 \text{ seg}$, determinada analíticamente [1].

En la fig. 3c observamos la isoterma $T = T_m$ obtenida por el MCE para los instantes dados, subdivididos en 1, 10 y 100 pasos. Nótese la subestimación progresiva de la liberación de calor latente (para $t = \Delta t = 5400 \text{ seg}$, el dominio resulta totalmente sólido).

La fig. 3d corresponde al MBT con la misma discretización temporal usada anteriormente.

Con respecto al desempeño del esquema de Newton-Raphson, éste permite convergencia cuadrática en ambos casos, como era de esperar. En el caso del MCE, es imprescindible la instrumentación de un mecanismo de búsqueda lineal para obligar a la solución a encontrar su radio de convergencia. Usando el MBT, tal situación se presenta cuando se adoptan pasos de tiempo grandes, debiéndose aplicar aquí sólo para $t = \Delta t = 5400 \text{ seg}$. También se ha notado que la velocidad de convergencia del MBT es considerablemente mayor a la lograda con el MCE cuando se toman pocos incrementos de tiempo, diferencia que tiende a desaparecer a medida que su número aumenta. Por ejemplo, mientras que con el MBT se logró convergir en 7 iteraciones para $t = \Delta t = 600 \text{ seg}$ y $t = \Delta t = 2400 \text{ seg}$ (con la tolerancia establecida), aplicando el MCE se

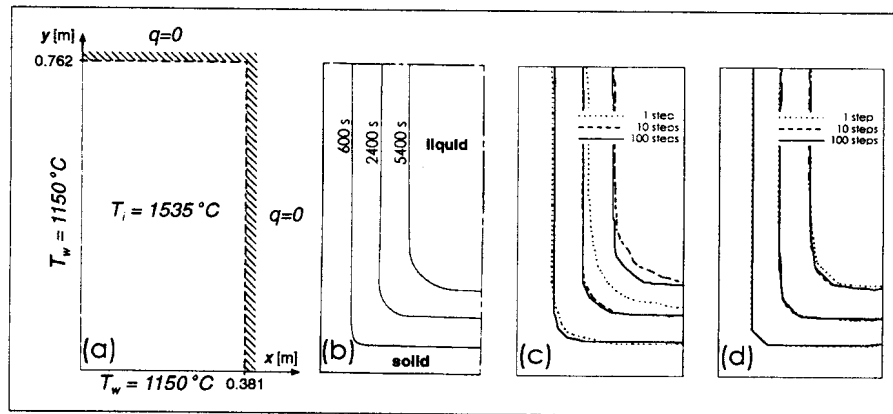


Figura 3: a) Solidificación de acero en el horno de recalentamiento. Posición del frente de solidificación. b) Solución analítica. c) Modelo de capacitancia efectiva. d) Modelo basado en la temperatura.

requirieron 4 iteraciones más. No son comparables los valores para $t = \Delta t = 5400$ seg dada la linealización que experimenta el problema al utilizar el MCE. Por su parte, si se toman 100 pasos, los rendimientos prácticamente se igualan: 3.3–3.5, 4.0–4.2 y 4.3–4.6 iteraciones por paso en promedio para $t = 600$ seg, $t = 2400$ seg y $t = 5400$ seg, respectivamente.

Por último, cabe mencionar que la opción de usar un esquema secante, a partir de no considerar la contribución de $\partial C^*/\partial T$ en el MCE o de $\partial L^*/\partial T$ en el MBT, se ha revelado completamente inviable: al detrimento en la velocidad se suma la finísima subdivisión temporal requerida para asegurar la convergencia (del orden de varios cientos de pasos para nuestro problema en los instantes analizados).

4 Conclusiones

Se presentan dos modelos eficientes para resolver problemas de conducción con cambio de fase. Ambos comparten la ventaja de presentar convergencia cuadrática gracias a los esquemas tangentes propuestos. El modelo de capacitancia efectiva es más sencillo en su programación y puede ser incorporado sin mayor esfuerzo en códigos existentes. Presenta como inconveniente la pérdida gradual de la conservatividad del sistema a medida que se aumenta el tamaño del incremento de tiempo debido al deterioro en la evaluación de los efectos del calor latente por regularización (que resultan menospreciados). Por lo tanto, el empleo de este modelo exige adoptar pasos de tiempo suficientemente pequeños.

La aplicación del método basado en la temperatura que proponemos muestra su potencial cuando la subdivisión temporal es grosera. La conservatividad del esquema prácticamente no es afectada por el refinamiento temporal, pudiendo adoptarse éste únicamente en función de los instantes en que desee conocerse el estado del sistema. Por lo tanto, su desempeño es notable si se trata de establecer la posición final de la interfase. Esta ventaja puede resultar determinante en gran cantidad de problemas en los cuales la no linealidad de los coeficientes dentro de cada fase puede despreciarse frente a la que introduce la interfase. Tal es el caso del proceso de solidificación de aceros para el que han sido desarrollados los presentes modelos.

Finalmente, en cuanto a la naturaleza del cambio de fase, sea éste isotérmico o “mushy”, el modelo basado en la temperatura permite analizar estrictamente ambos casos, mientras que el de

capacitancia admite únicamente problemas del último tipo. Sin embargo, se ha observado que ello no es una limitación apreciable por cuanto los problemas isotérmicos pueden representarse con adecuada precisión introduciendo un pequeño intervalo de solidificación.

Referencias

- [1] B. G. Thomas, I. V. Samaresekera, J. K. Brimacombe. Comparison of numerical modeling techniques for complex, two-dimensional, transient heat-conduction problems. *Metallurgical Transactions B*, 15B:307-318, 1984.
- [2] L. A. Crivelli, S. R. Idelsohn. Solución numérica del problema de transmisión de calor con cambio de fase. *Revista Internacional de Métodos Numéricos para Cálculo y Diseño en Ingeniería*, 1(2):43-66, 1985.
- [3] A. J. Dalhuijsen, A. Segal. Comparison of finite element techniques for solidification problems. *Int. J. Numer. Methods Eng.*, 23:1807-1829, 1986.
- [4] M. Salcudean, Z. Abdullah. On the numerical modelling of heat transfer during solidification processes. *Int. J. Numer. Methods Eng.*, 25:445-473, 1988.
- [5] L. S. Yao, J. Prusa. Melting and freezing. In J. P. Harnett, T. F. Irvine Jr., editor, *Advances in Heat Transfer*, pages 1-95, Academic Press, 1989.
- [6] V. R. Voller, C. R. Swaminathan, B. G. Thomas. Fixed grid techniques for phase change problems: a review. *Int. J. Numer. Methods Eng.*, 30:875-898, 1990.
- [7] S. R. Idelsohn, M. A. Storti, L. A. Crivelli. Numerical methods in phase-change problems. *Arch. Comp. Methods Eng.*, 1:49-74, 1994.
- [8] L. A. Crivelli, S. R. Idelsohn. A temperature-based finite element solution for phase-change problems. *Int. J. Numer. Methods Eng.*, 23:99-119, 1986.
- [9] S. Del Giudice, G. Comini, R. Lewis. Finite elements simulation of freezing processes in soils. *Int. J. Numer. Anal. Methods Geomech.*, 2:223-235, 1978.
- [10] K. K. Tamma, R. R. Namburu. Recent advances, trends and new perspectives via enthalpy-based finite element formulations for applications to solidification problems. *Int. J. Numer. Methods Eng.*, 30:803-820, 1990.
- [11] M. Yao, A. Chait. An alternative formulation of the apparent heat capacity method for phase-change problems. *Metallurgical Transactions B*, 24B:279-300, 1993.
- [12] O.C.Zienkiewicz, R.L.Taylor. *El Método de los Elementos Finitos*. Volume 1: Formulación Básica y Problemas Lineales, McGraw-Hill, CIMNE, 1995.
- [13] Q. T. Pham. The use of lumped capacitance in the finite-element solution of heat conduction problems with phase change. *Int. J. Heat Mass Transfer*, 29(2):285-291, 1986.
- [14] M. A. Storti, L. A. Crivelli, S. R. Idelsohn. Making curved interfaces straight in phase-change problems. *Int. J. Numer. Methods Eng.*, 24:375-392, 1987.
- [15] D. Celentano, E. Oñate, S. Oller. A temperature-based formulation for finite element analysis of generalized phase-change problems. *Int. J. Numer. Methods Eng.*, 37(20):3441-3465, 1994.
- [16] M. A. Storti, L. A. Crivelli, S. R. Idelsohn. An efficient tangent scheme for solving phase-change problems. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, 66:65-86, 1988.