

ESTIMACIÓN DEL FLUJO DE CALOR QUE INGRESA A UNA SUSTANCIA DE CAMBIO DE FASE POR UN MÉTODO DE SOLUCIÓN DE PROBLEMA INVERSO

ESTIMATION OF THE HEAT FLUX THAT ENTERS A PHASE CHANGE SUBSTANCE BY AN INVERSE PROBLEM SOLVING METHODE

Ricardo F. Lozano

Universidad Nacional de Salta, Avda. Bolivia 5150, Salta, Argentina, lozano.r.fed@gmail.com

Palabras clave: problema inverso, problema de Stefan, conducción de calor.

Resumen. Se presenta el ensayo numérico de un método de solución de problemas inverso de transferencia de calor, para estimar un flujo de calor constante que ingresa a una sustancia de cambio de fase. El método consiste en la minimización, con una técnica de estabilización, de la suma de cuadrados de las diferencias entre las temperaturas “medidas” y estimadas, mediante la anulación de su gradiente con respecto a los parámetros desconocidos que determinan el flujo de calor. Las temperaturas se obtienen mediante la resolución numérica de un problema de Stefan a una fase. La técnica de solución conduce a un algoritmo computacional iterativo que se tradujo al lenguaje Wolfram Mathematica. Al ejecutar el algoritmo con temperaturas “medidas”, obtenidas por resolución del problema directo con un flujo de calor dado que representa el flujo desconocido, a las que se sumó un número aleatorio para representar el error de medición, se obtuvo una rápida convergencia al flujo dado a partir de distintas conjeturas iniciales para el flujo que determina las temperaturas estimadas.

Keywords: inverse problem, Stefan problem, heat conduction.

Abstract. The numerical test of a method for solving inverse heat transfer problems, to estimate a constant heat flux that enters a phase change substance, is presented. The method consists of minimizing, with a stabilization technique, the sum of squares of the differences between the "measured" and estimated temperatures, by canceling their gradient with respect to the unknown parameters that determine the heat flux. The temperatures are obtained by numerical resolution of a one-phase Stefan problem. The solution technique leads to an iterative computational algorithm that was translated into the Wolfram Mathematica language. When executing the algorithm with "measured" temperatures, obtained by solving the direct problem with a given heat flux representing the unknown flux, to which a random number was added to represent the measurement error, a fast convergence to the given flux was obtained from different initial guesses for the flow that determines the estimated temperatures.

1 INTRODUCCIÓN

Los Problemas Inversos en Transferencia de Calor dependen de mediciones de temperatura o flujo de calor para la estimación de parámetros desconocidos que están incluidos en el análisis de problemas térmicos. Por ejemplo, un problema inverso en conducción de calor, es la estimación del flujo de calor en el borde de un material, mediante el uso de temperaturas medidas en su interior. En tanto que en un problema directo de conducción de calor, el flujo de calor en el borde y las propiedades termofísicas de un material se suponen conocidos y se busca determinar el campo térmico en el mismo.

Desde un punto de vista matemático los problemas inversos están mal planteados debido a la falta de estabilidad y a la no linealidad de los mismos. Los métodos de resolución de un problema inverso requieren la solución del Problema Directo lo que se puede realizar en forma numérica o si la situación lo permite, adaptar la disposición experimental para usar una solución analítica.

En un trabajo anterior (Lozano y Vilte, 2018) se determinaron el flujo de calor y las propiedades termofísicas de una grasa orgánica por un método de problema inverso. En ese trabajo se empleó una solución analítica del problema directo.

El comportamiento de sustancias que presentan cambio de fase ha sido analizado y conceptualizado por Stefan, (1889a, 1889b) por lo que tales problemas llevan su nombre. En particular, éstos presentan solución analítica sólo bajo determinadas condiciones: unidimensionalidad, geometría semi-infinita, propiedades termofísicas constantes, temperatura inicial uniforme, temperatura constante impuesta en el borde fijo, o bien flujo de calor inversamente proporcional a la raíz cuadrada del tiempo. (Alexiades y Solomon, 1993).

La condición de flujo constante en el borde es de considerable importancia práctica. Esta tiene lugar cuando el calor es generado por un elemento de calentamiento plano por el que circula una corriente eléctrica, si el calor es generado por fricción, etc. (Carslaw and Jaeger, 1959).

Por este motivo y dado que es más frecuente disponer de la solución numérica del problema directo, resulta interesante desarrollar un programa de un método de solución de problema inverso que emplee este tipo de solución y estime el flujo de calor constante que ingresa a una sustancia de cambio de fase. En este trabajo se emplea la solución numérica de un problema de Stefan a una fase con frente de fusión inicial cuando la sustancia está sometida a un flujo externo que depende del tiempo, para desarrollar un programa que estima el flujo de calor constante que ingresa a una sustancia de cambio de fase.

2 FORMULACIÓN DEL PROBLEMA

2.1 El problema directo.

Se considera el problema de fusión de una sustancia de cambio de fase que ocupa la región $0 \leq x < \infty$. El calor que ingresa por el borde fluye en forma lineal por la sustancia que se supone isotrópica y con propiedades termofísicas constantes. Inicialmente una parte de la sustancia en la región $0 \leq x < b$ está líquida con una distribución de temperatura conocida $\varphi(x) \geq 0$, el resto de la sustancia está sólida a la temperatura de fusión, que sin pérdida de generalidad puede hacerse cero grado, tal como se muestra en la fig. 1. Se aplica un flujo de calor en el borde que causa el aumento de temperatura de la fase líquida y fusión en la fase sólida. La extensión de la fase líquida aumenta y por tanto la frontera $s(t)$ entre las fases, ubicada inicialmente en $x=b$, se desplaza a la derecha. El problema resulta descrito por las ecuaciones (1) a (6), siendo τ el tiempo total de cálculo (Alexiades y Solomon, 1993). Se designa con $T(x,t)$ a la temperatura en la fase líquida. Los parámetros físicos del material de

cambio de fase son: ρ la densidad, k la conductividad térmica, c el calor específico, L el calor latente de fusión y $\alpha = k/(\rho c)$ la difusividad térmica y q el flujo de calor que ingresa a la sustancia en $x=0$. El flujo de calor en el borde es q .

$$\frac{\partial T}{\partial t} = \alpha \frac{\partial^2 T}{\partial x^2} \quad 0 < t < \tau \quad 0 < x < s(t) \quad (1)$$

$$\rho L \frac{ds}{dt} = -k \frac{\partial T(s(t), t)}{\partial x} \quad 0 < t < \tau \quad (2)$$

$$T(s(t), t) = 0 \quad 0 < t < \tau \quad (3)$$

$$T(x, 0) = \varphi(x) \quad 0 < x < b \quad (4)$$

$$s(0) = b \quad (5)$$

$$q = -k \frac{\partial T}{\partial x}(0, t) \quad 0 < t < \tau \quad (6)$$

La ecuación (1) es la de difusión en el líquido, que determina la distribución de temperatura en él. La ecuación (2) es la de Stefan, que da el balance de energía en la interfase. Las ecuaciones (3) - (6) son las condiciones iniciales y de borde. Conocidos el flujo de calor y las propiedades termofísicas se busca determinar el campo térmico $T(x, t)$ y la posición de la frontera $s(t)$.

Se muestra en la figura 1 la situación inicial de la sustancia.

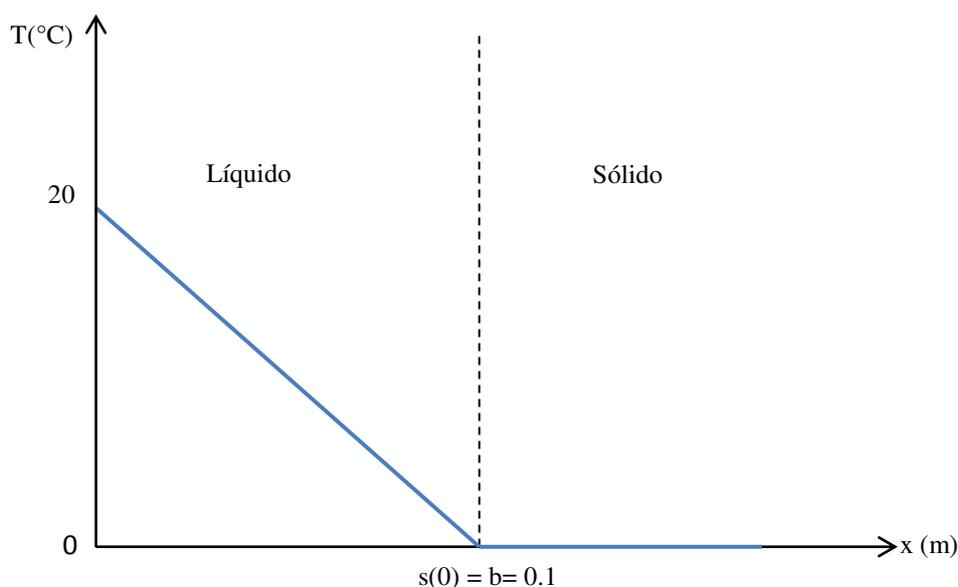


Figura 1: Estado inicial de la sustancia.

El perfil de temperatura en la fase líquida a las 25 hs. de iniciado el proceso se muestra en la fig 2 para un flujo de 20 y de 400 W/m^2 . Las propiedades termofísicas empleadas para

ejecutar el programa son $c = 6950 \text{ J/(kg K)}$, $\rho = 914.5 \text{ kg/m}^3$, $L = 140000 \text{ J/kg}$ y $k = 0.76 \text{ W/(m K)}$. Las posiciones de los nodos son $x_{j+1} = x_j + \Delta x$ con $j = 1, 2, \dots$ y $x_1 = 0$ y $\Delta x = 0.001 \text{ m}$. Se puede observar que con un flujo de 20 la temperatura en el borde ha disminuido y aumentó para el flujo de 400. La difusividad térmica de la sustancia hipotética empleada en el ensayo es $1.2 \cdot 10^{-7} \text{ m}^2/\text{s}$, similar a la madera por ejemplo, por lo que domina el fenómeno de almacenamiento sobre el conductivo lo que se manifiesta en el avance relativamente lento de la frontera entre las fases y en los cambios de temperatura en el borde.

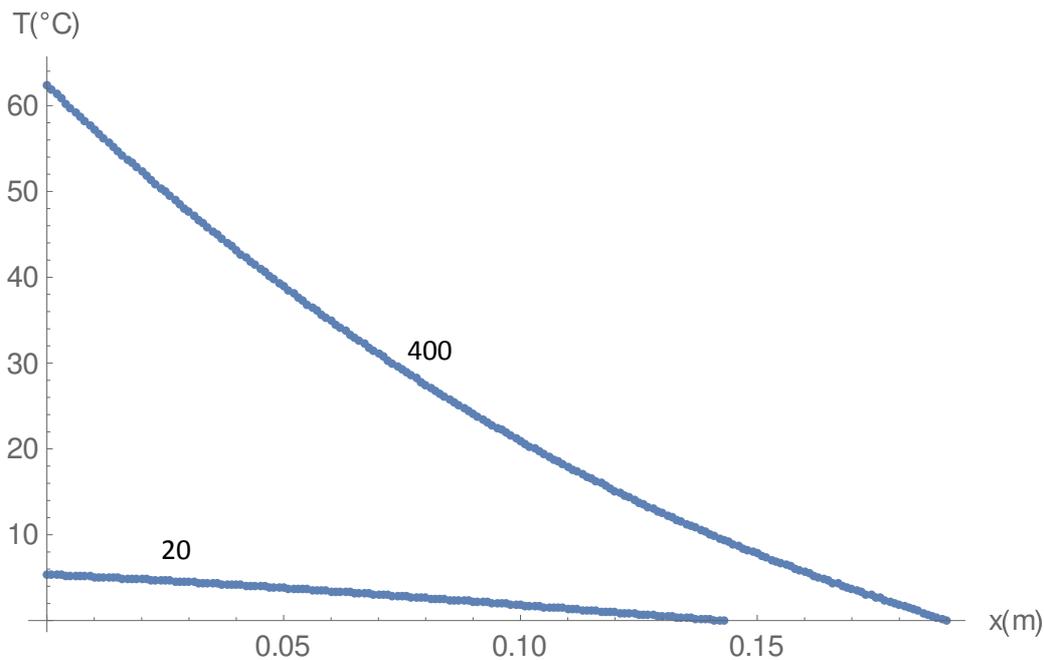


Figura 2: Estado térmico a las 25 hs. de iniciado el proceso.

En la figura 3 se muestra la evolución de la temperatura en los nodos 0 y 100 para un flujo de 400 W/m^2 .

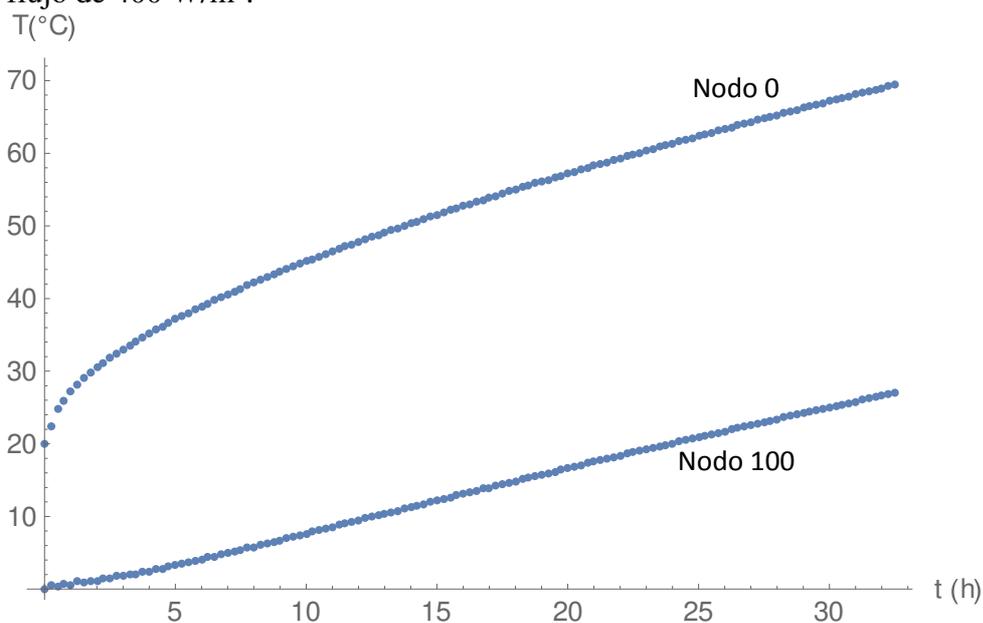


Figura 3: Evolución de la temperatura en los nodos 0 y 100.

El término a una fase hace referencia a que solo una de las fases está activa en el sentido de presentar cambios de temperatura, mientras que la otra permanece a la temperatura de fusión. Por lo tanto, la extensión de la fase líquida solamente puede aumentar a costa de la otra fase, lo que implica que la frontera entre las fases debe avanzar. Como consecuencia la solución de Stefan a una fase requiere el ingreso de calor en el borde o sea que el flujo de calor debe ser únicamente positivo durante todo el proceso y la sustancia debe estar como mínimo a la temperatura de fusión.

2.2 El problema inverso.

Se considera un problema similar al dado por las ecuaciones (1-6), pero en la ecuación (6) el flujo de calor q es desconocido, y se busca estimarlo. Como información adicional se tiene las temperaturas medidas en el interior de la sustancia, en determinados tiempos y lugares, cuando la sustancia está sometida al flujo desconocido. En esos lugares estarían ubicados los sensores que en una situación experimental, tomarían medidas en esos tiempos.

Se denotan con Y_{im} , las temperaturas medidas en los puntos interiores x_m ($m = 1, 2, \dots, M$), los tiempos t_i ($i = 1, \dots, I$). M denota el número de sensores e I es el número de medidas que serían tomadas por cada sensor, cuando la sustancia está afectada por el flujo desconocido.

La resolución del problema directo debe adaptarse para obtener las temperaturas estimadas en esos lugares y tiempos. El método empleado requiere parametrizar el flujo que determina las temperaturas estimadas, por ejemplo en la forma, $q = \sum_{k=1}^N P_k f_k(t)$ donde N es el número de parámetros a determinar, P_k denota los parámetros y $f_k(t)$ indica una función conocida del tiempo. De lo cual resulta que las temperaturas estimadas son función de los parámetros desconocidos P_k , $T_{im} = T_{im}(\mathbf{P})$ con $\mathbf{P} = (P_1, P_2, \dots, P_N)$

3 MODELO DE CÁLCULO

La solución de este problema está basada en la minimización de la norma de cuadrados mínimos ordinaria S , en un proceso iterativo a partir de una conjetura inicial, \mathbf{P}^0 , para los parámetros desconocidos:

$$S(\mathbf{P}^k) = \sum_{m=1}^M \sum_{i=1}^I [Y_{im} - T_{im}(\mathbf{P}^k)]^2 \quad (7)$$

El supraíndice k es el número de iteraciones.

Se requiere el cálculo de la matriz de sensibilidad \vec{J} cuyos elementos se conocen como los coeficientes de sensibilidad, definidos por:

$$J_{kj}(\vec{P}) = \frac{\partial T_k(\vec{P})}{\partial P_j}, \quad k = 1, \dots, (I-1)M + M; \quad j = 1, \dots, N \quad (8)$$

donde P_j denota un parámetro desconocido y N es el número de parámetros. Los subíndices k y j se refieren al número de filas y columnas de la matriz de sensibilidad respectivamente. El número de filas k está relacionado a la medida temporal t_i y al sensor m por la expresión, $k = (i-1)M + m$. La resolución del problema requiere que la matriz $(\mathbf{J}^T \mathbf{J})$ sea no singular.

La aproximación numérica para el cómputo de los coeficientes de sensibilidad está dada por la fórmula (9) de diferencia progresiva para la derivada primera

$$J_{ij} = \frac{T_i(P_1, \dots, P_j + \varepsilon, P_j, \dots, P_N) - T_i(P_1, \dots, P_j, \dots, P_N)}{\varepsilon P_j}; \quad \varepsilon = 10^{-6} \quad (9)$$

La técnica empleada se denomina método de Levenberg-Marquardt (Ozisik, M y Orlande H, 2000) y está dado por:

$$\mathbf{P}^{k+1} = \mathbf{P}^k + \Delta \mathbf{P}^k \quad (10)$$

Donde $\Delta \mathbf{P}^k$ es solución del sistema lineal de ecuaciones algebraicas (11)

$$\left[(\vec{J}^k)^T \vec{J}^k + \mu^k \vec{\Omega}^k \Delta \mathbf{P}^k \right] = (\vec{J}^k)^T [\mathbf{Y} - \mathbf{T}(\mathbf{P}^k)] \quad (11)$$

$\vec{\Omega}^k$ es una matriz diagonal cuya diagonal es la diagonal de la matriz $(\vec{J}^k)^T \vec{J}^k$. El parámetro de amortiguamiento μ^k se hace cero si $\left| \det \left((\vec{J}^k)^T \vec{J}^k \right) \right| > 1$ o bien parte del valor 0.001 y se multiplica por 10 cuando la función objetivo $S(\mathbf{P}^{k+1}) > S(\mathbf{P}^k)$ y se divide por 10 en el caso contrario.

El criterio de detenimiento empleado es $S(\mathbf{P}^{k+1}) < s$ donde s se hace del orden de la suma de módulos de los errores de las temperaturas medidas.

4 ENSAYO NUMÉRICO Y RESULTADOS

Para comprobar la efectividad del método y la corrección del programa se realizó un ensayo numérico.

Las temperaturas “medidas”, se obtuvieron numéricamente de la siguiente forma: se resolvió el problema directo para un flujo dado, que representa el flujo desconocido y se recogieron las temperaturas en los lugares y los tiempos que corresponderían a los sensores. A efectos del ensayo se emplearon flujos constantes de 20 W/m² y 400 W/m². Se calcularon 131 temperaturas en el borde de la sustancia, $x_1 = 0$, y en la posición inicial de la interfase, $x_2 = b = 0.1$ m, cada 900 seg., como se muestra en la fig.3. A esos valores de temperatura calculados numéricamente, se sumó en cada instante de medición un número aleatorio entre -0.5 y 0.5 (ruido blanco) que representa el error de medición.

El flujo que determina las temperaturas estimadas, por resolución del problema directo, fue parametrizado de la forma, $q = P$. El método de solución del problema inverso parte de una conjetura inicial para los parámetros con la cual se resuelve el problema directo, luego en el proceso iterativo se recalculan forma automática, hasta que se satisface el criterio de detenimiento.

El programa se implementó en lenguaje Wolfram- Mathematica. Para el criterio de detenimiento se prescribió un valor de $s = 50$. En todas las pruebas el flujo “desconocido” es constante y se le dieron dos valores distintos.

Los resultados del ensayo con flujo “desconocido” de 20 W/m² se presentan en tabla 1

Conjetura inicial(W/m ²)	Función objetivo inicial	Nº de iteraciones	Flujo estimado(W/m ²)	Función objetivo
P^0	S^0	k	P^k	S^k
60	3267	1	19.81	21.29
10	204	1	19.7	21.25

Tabla 1: Resultados con flujo desconocido 20

Los resultados con flujo “desconocido” de 400 W/m² se muestran en la tabla 2:

Conjetura inicial(W/m ²)	Función objetivo inicial	N° de iteraciones	Flujo estimado(W/m ²)	Función objetivo
P ⁰	S ⁰	k	P ^k	S ^k
10	302147	1	415.481	526
		2	400.082	21.40
600	87132	1	399.2	23.4

Tabla 2: Resultados flujo con flujo desconocido 400.

Se observa que en tres de cuatro pruebas presentadas el método converge al flujo “desconocido” y cumple con el criterio de detenimiento en una iteración. En la prueba con flujo desconocido 400 y conjetura inicial 10 se necesitaron dos iteraciones. En este caso la función objetivo inicial es de orden 10^5 , al menos un orden de magnitud mayor que en las otras pruebas.

5 CONCLUSIONES

El método empleado es efectivo para estimar un flujo que se sabe constante y se desea determinar su valor. El método converge rápidamente al valor buscado y la función objetivo se hace menor que el valor de la tolerancia s prescripta. El número total de temperaturas “medidas” en este ensayo, 262 supera ampliamente el número de parámetros a determinar, uno, lo que propicia la notable efectividad del método.

El programa del método de problema inverso incluye el programa que resuelve numéricamente el problema directo por lo que un funcionamiento efectivo de este último es condición necesaria para implementar el primero. Sobre todo si se tiene en cuenta que en cada iteración del método se resuelve varias veces el problema directo.

El empleo del problema de Stefan a una fase como problema directo lleva al primero al límite de su rendimiento y limita el método de inverso a poco más que la estimación de flujos desconocidos constantes donde solo se necesita estimar un parámetro. Cuando es necesario estimar varios parámetros, en la instancia de su cálculo automático, estos pueden dar valores que hagan negativo o cero el flujo que determina las temperaturas estimadas lo que es inconsistente con el problema a una fase tipo fusión.

El programa puede ser adaptado a situaciones experimentales en las cuales el flujo de calor se pueda suponer lineal y la sustancia presente una longitud finita aislando térmicamente las superficies externas de la sustancia por donde no ingresa calor. También es adaptable a un problema de solidificación con flujo constante.

El programa puede emplearse para situaciones experimentales con uno o varios sensores que toman medidas en puntos discretos en tiempo y espacio elegidos convenientemente.

REFERENCIAS

- Lozano, R y Vilte, M. *Estimación de Parámetros Térmicos de una Grasa por un Método de Solución de Problema Inverso*. Mecánica Computacional. Asociación Argentina De Mecánica Computacional. (MECOM 2018) Vol. XXXVI págs. 2159-2167, 2018.
- Ozisik, M. N., and Orlande, H. R. B., *Inverse Heat Transfer*, CRC Press, Taylor & Francis Group, 2000.
- Alexiades, V., and Solomon, A., *Mathematical Modeling of Melting or Freezing Processes*, Hemisphere Publishing Corporation, A Member of the Taylor & Francis Group, 1993.

- Carslaw, H.S., and Jaeger, J.C., *Conduction of Heat in Solids*, Oxford University Press, 1959
- Stefan, J. (1889a) *Ueber die theorie der eisbildung, insbesondere ueber die eisbildung im Polarmeer*. *Zit.Akad.Wiss.Wien, Math.Cl.*, 98, pp.965-983.
- Stefan, J. (1889b) *Uber einige Probleme der Theorie der Wärmeleitung*. *Zit. Akad. Wiss. Wien, Math.Cl.*, 98, pp.473-484.
- Wolfram, S. *Mathematica 10, Version Number 10.3.*. Wolfram Research Inc. © 2015.