

UNA SOLUCIÓN COMPLETAMENTE ANALÍTICA PARA PROBLEMAS DE TRANSFERENCIA DE CALOR POR ADVECCIÓN-CONDUCCIÓN UNIDIMENSIONAL CON CAMBIO DE FASE SÓLIDO-LÍQUIDO NO ISOTÉRMICO

A FULLY ANALYTICAL SOLUTION FOR 1-D ADVECTION-CONDUCTION HEAT TRANSFER PROBLEMS WITH NON-ISOTHERMAL SOLID-LIQUID PHASE CHANGE

Mauricio R. Mascotto^{a,b}, Juan C. Álvarez Hostos^b y Antonio Caggiano^c

^a*Centro de Investigación y Transferencia Rafaela (CIT) Rafaela, Universidad Nacional de Rafaela
(UNRaf)/Consejo Nacional de Investigaciones Científicas y Técnicas (CONICET)*

^b*Facultad de Ingeniería Química, Universidad Nacional del Litoral*

^c*Dipartimento di Ingegneria Civile, Chimica e Ambientale, Università degli Studi di Genova*

Palabras clave: Advección-conducción, solución analítica, cambio de fase, aleaciones, no-isotérmico, fracción sólida.

Resumen. Se presenta una solución analítica para problemas térmicos unidimensionales en estado estacionario de advección-conducción, para sustancias con cambios de fase sólido-líquido no isotérmico. Se consideran fases sólidas y líquidas con propiedades físicas y de transporte contrastantes, y el manejo matemático en la zona bifásica se garantiza con técnicas de promediado basadas en la derivada de la fracción de fase sólida con respecto a la temperatura. La validez se demuestra mediante comparación con soluciones numéricas basadas en el método de Galerkin libre de elementos, y se prueba para un rango de números de Péclet. La solución es aplicable a diferentes modelos microscópicos de cambio de fase sólido-líquido, es decir, reglas de equilibrio y no equilibrio. Se encuentran aplicaciones en el análisis de procesos de fabricación aditiva por arco y metalurgia secundaria. El desarrollo posee concordancia con las soluciones numéricas para todo el rango de números de Péclet considerados, independientemente del rango de temperatura y modelo de cambio de fase.

Keywords: Advection-conduction, analytical solution, phase change non-isothermal

Abstract. This work presents an analytical solution for steady 1-D advection-conduction heat transfer in materials undergoing non-isothermal solid-liquid phase change. The model accommodates contrasting thermophysical properties between solid and liquid phases and mathematically handles the mushy zone using averaging techniques based on the solid fraction temperature derivative. Validated using numerical solutions based on the element-free Galerkin (IEFG) method across a range of Péclet numbers, the solution demonstrates excellent agreement regardless of the phase change temperature range or the microscopic model (equilibrium or non-equilibrium). This approach is applicable to processes such as wire arc additive manufacturing and secondary metallurgy.

1. INTRODUCCIÓN

Los fenómenos de transferencia de calor con cambio de fase, ya sea fusión o solidificación, ocurren con flujo de calor discontinuo en la interfase. Dicha discontinuidad está relacionada a la absorción o liberación de energía debida al calor latente del material, lo que introduce dificultades para su solución ya que las posiciones de dichas interfaces no son conocidas a priori. Estos fenómenos se encuentran en aplicaciones como colada continua de metales, almacenamiento de energía térmica con cambio de fase, crecimiento cristalino en geotermia, soldadura, entre otros (Hahn y Özişik, 2012). Los casos de sustancias puras presentan una única interfaz móvil de posición y velocidad desconocidas. En las mezclas de sustancias el cambio de fase ocurre en un rango de temperaturas por ser no isotérmico. Esto da paso a la existencia a una zona intermedia llamada pastosa (mushy) donde co-existen ambas fases y se divide el dominio líquido del sólido. La dificultad principal se encuentra en hallar una solución analítica para la posición de dichos frentes de cambio de fase, estos se presentan en forma de variables adicionales que forman un conjunto de ecuaciones no lineales para el sistema (Chung et al., 1999; Chakraborty y Dutta, 2002). Las principales contribuciones en este tema constan de soluciones analíticas unidimensionales para sustancias puras con propiedades dependientes de la temperatura, transporte advectivo o condiciones de borde dependientes del tiempo. A pesar de estos aportes, la disponibilidad de soluciones analíticas para mezclas de sustancias o aleaciones sigue siendo limitada. Solo existen desarrollos por medio de simplificaciones o aproximaciones tales como asumir la variación lineal de la fracción sólida en la zona pastosa, asumir propiedades térmicas constantes, asumir la variación lineal de la fracción sólida con la temperatura y de la distancia hasta el frente líquido, implementar métodos integrales aproximados, entre otros. Chung et al. (Chung et al., 1999), dirigió su trabajo a evitar tales sobre-simplificaciones, llegando a una solución semi-analítica. Más adelante, Chakraborty y Dutta (Chakraborty y Dutta, 2002) desarrollaron exitosamente una solución completamente analítica para la solidificación de soluciones binarias. Los trabajos anteriormente nombrados se centran en casos de conducción transitoria, mientras que la investigación existente sobre problemas que implican mecanismos de transporte por advección-difusión es aún muy limitada, tanto para problemas de estado transitorio como estacionario. Hasta el momento no existe en la literatura una solución completamente analítica y cerrada para problemas de transferencia de calor de tipo advectivo-difusivo con cambio de fase sólido-líquido no isotérmico, para mezclas binarias. La solución presentada en este trabajo se da en un marco estacionario 1-D como el de la figura 1, donde hay una significativa interacción entre el fenómeno de advección y conducción. El perfil de temperatura en la región pastosa se obtiene extendiendo la técnica de promedios ponderados en problemas de conducción transitoria del calor de Chakraborty y Dutta (Chakraborty y Dutta, 2002), al caso de advección-difusión. Los resultados son comparados con soluciones numéricas de alta precisión basadas en el método de Galerkin libre de elementos, abarcando un amplio rango de parámetros físicos que gobiernan el problema no lineal a tratar.

2. DESARROLLO DEL MODELO ANALÍTICO

Considerando el problema de transporte de la Figura 1, donde un material en estado inicialmente líquido se mueve con una velocidad uniforme hacia la derecha en un dominio unidimensional $0 \leq x < L$. Las temperaturas en los bordes permanecen constantes a $T_0 \geq T_{liq}$ y $T_L \geq T_{sol}$ respectivamente. Las temperaturas T_{liq} y T_{sol} corresponden a las temperaturas solidus y liquidus en el diagrama de fase del material. Además, se tiene en consideración que las propiedades físicas y de transporte son independientes de la temperatura, pero pueden ser

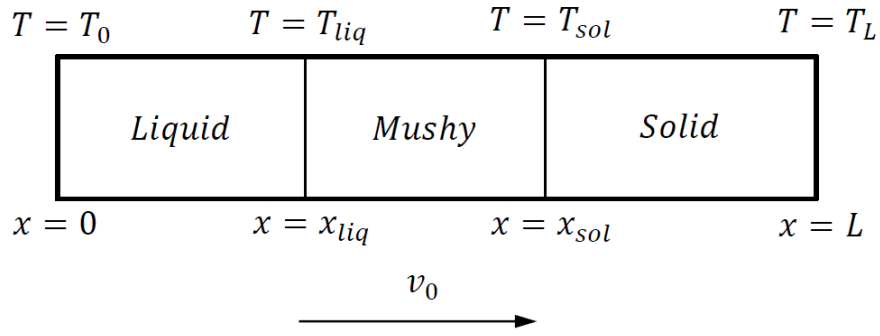


Figura 1: Modelo de transporte 1-D de advección-difusión con cambio de fase

diferentes en cada zona, la densidad es considerada constante en todo el dominio para asegurar la continuidad, la relación entre la temperatura y la fracción sólida en la zona pastosa puede ser descrita por condiciones de equilibrio locales (regla de la palanca) o reglas de no equilibrio (regla de Scheil y Flemings). Además, el problema se resuelve en estado estacionario, por lo que la temperatura depende solo de la posición, el transporte difusivo de especies es despreciable comparado con la difusión térmica y las propiedades en la zona pastosa se aproximan interpolando linealmente las propiedades de la fase sólida a una temperatura equivalente promediada. Las ecuaciones que gobiernan el sistema son:

$$\begin{aligned} v_0 \frac{\partial T}{\partial x} &= \alpha_l \frac{\partial^2 T}{\partial x^2} & 0 \leq x < x_{liq} \\ v_0 \frac{\partial T}{\partial x} &= \alpha_{m'} \frac{\partial^2 T}{\partial x^2} & x_{liq} \leq x \leq x_{sol} \\ v_0 \frac{\partial T}{\partial x} &= \alpha_s \frac{\partial^2 T}{\partial x^2} & x_{sol} < x \leq L. \end{aligned}$$

Los subíndices l , s y m' corresponden a las zonas líquida, sólida y pastosa, respectivamente. La conductividad térmica y calor específico en la zona pastosa se calculan de acuerdo a:

$$\begin{aligned} k_m &= k_s f_s^{(eq)} + k_l (1 - f_s^{(eq)}) \\ C_m &= C_s f_s^{(eq)} + C_l (1 - f_s^{(eq)}) \end{aligned}$$

donde $f_s^{eq} = f_s(T_{eq})$ es la fracción sólida evaluada a una temperatura equivalente tal que:

$$\frac{df_s(T_{eq})}{dT} = \frac{df_s^{(eq)}}{dT} = \frac{\int_{T_{sol}}^{T_{liq}} \frac{df_s}{dT} d\Omega}{(T_{liq} - T_{sol})}.$$

La tilde en el sub-índice de la difusividad térmica correspondiente a la zona pastosa está para indicar que la misma se calcula incluyendo los efectos del cambio de fase como sigue:

$$\alpha_{m'} = \frac{k_m}{\rho \left(C_m - \Delta H_f \frac{df_s^{(eq)}}{dT} \right)}$$

Se resuelve el sistema con lo anteriormente dicho e individualizan los frentes líquido y sólido considerando la conservación de energía interna en las interfaces. Luego de adimensionalizar los parámetros, se obtiene una solución de la forma:

$$\theta = \begin{cases} (1 - \theta_{liq}) \frac{(e^{Pe.\xi_{liq}} - e^{Pe.\xi})}{e^{Pe.\xi_{liq}} - 1} + \theta_{liq} & 0 \leq \xi \leq \xi_{liq} \\ (\theta_{liq} - \theta_{sol}) \frac{(e^{Pe.\xi_{sol}.b_{m'}} - e^{Pe.\xi.b_{m'}})}{e^{Pe.\xi_{sol}.b_{m'}} - e^{Pe.\xi_{liq}.b_{m'}}} + \theta_{sol} & \xi_{liq} \leq \xi \leq \xi_{sol} \\ \theta_{sol} \frac{(e^{Pe.b_s} - e^{Pe.\xi.b_s})}{e^{Pe.b_s} - e^{Pe.\xi_{sol}.b_s}} & \xi_{sol} \leq \xi \leq 1 \end{cases}$$

$$\theta = \frac{T - T_L}{T_0 - T_L} ; \theta_{liq} = \frac{T_{liq} - T_L}{T_0 - T_L} ; \theta_{sol} = \frac{T_{sol} - T_L}{T_0 - T_L} ; \xi = \frac{x}{l} ; b_{m'} = \frac{\alpha_l}{\alpha_{m'}} ; b_s = \frac{\alpha_l}{\alpha_s}$$

El sistema de ecuaciones no lineales a resolver, para los frentes ξ_{sol} y ξ_{liq} es:

$$\frac{g_{m'}}{e^{Pe.\xi_{sol}.b_{m'}} - e^{Pe.\xi_{liq}.b_{m'}}} e^{Pe.\xi_{liq}.b_{m'}} + \frac{(\theta_{liq} - 1)}{(\theta_{liq} - \theta_{sol})(e^{Pe.\xi_{liq}} - 1)} e^{Pe.\xi_{liq}} = \frac{f_s^{(liq)}}{St}$$

$$\frac{g_s \theta_{sol}}{(\theta_{liq} - \theta_{sol})(e^{Pe.b_s} - e^{Pe.\xi_{sol}.b_s})} e^{Pe.\xi_{sol}.b_s} - \frac{g_{m'}}{e^{Pe.\xi_{sol}.b_{m'}} - e^{Pe.\xi_{liq}.b_{m'}}} e^{Pe.\xi_{sol}.b_{m'}} = \frac{(1 - f_s^{(sol)})}{St}$$

$$St = \frac{C_l(T_{liq} - T_{sol})}{H_f} ; g_{m'} = \frac{(C_m - \Delta H_f \frac{df_s^{(eq)}}{dT})}{C_l} ; g_s = \frac{C_s}{C_l}$$

Donde C_l , C_m , C_s son el calor específico en la zona líquida, pastosa y sólida, respectivamente. H_f es el calor latente de fusión de la aleación binaria o mezcla. f_s^{eq} es la fracción sólida evaluada a una temperatura equivalente.

3. VALIDACIÓN NUMÉRICA

Para corroborar el correcto desarrollo de la solución analítica, esta se ha comparado con soluciones numéricas basadas en el método Galerkin libre de elementos (IEFG). En la figura 2 se muestra la comparación para la el sistema Fe-C utilizando la regla de la palanca y en la figura 3 para el sistema Al-Cu utilizando la regla de Scheil. Las soluciones se presentan para diferentes números de Péclet, y la precisión de la solución basada en el método IEFG se ha garantizado utilizando una distribución uniforme de nodos muy refinada. El problema se ha resuelto tanto para las aleaciones Fe-C como Al-Cu.

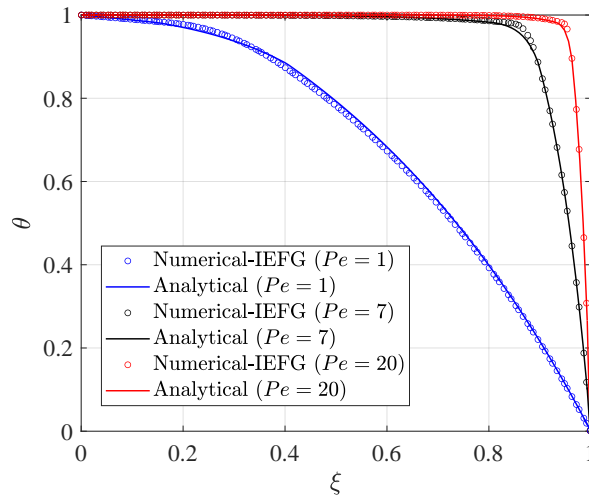


Figura 2: Comparación solución analítica y numérica basada en IIEFG, para Fe-C utilizando la regla de la palanca.

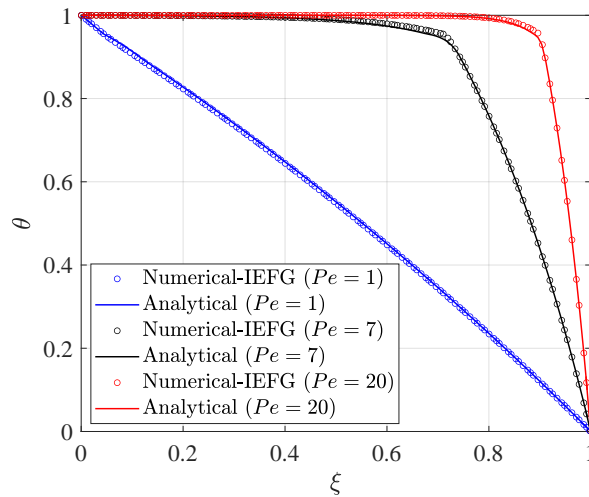


Figura 3: Comparación solución analítica y numérica basada en IIEFG, para Al-Cu utilizando la regla de Scheil.

Adicionalmente se analiza el error entre el método analítico y el numérico para una amplia gama de composiciones y números de Péclet, cuyos resultados se resumen en las superficies de respuesta presentadas en las Figuras 4 y 5. Dichos resultados muestran errores menores al 1 % en todo el espectro de St y Pe analizados, y esta alta precisión se mantiene independientemente de la composición o del mecanismo de transporte considerado.

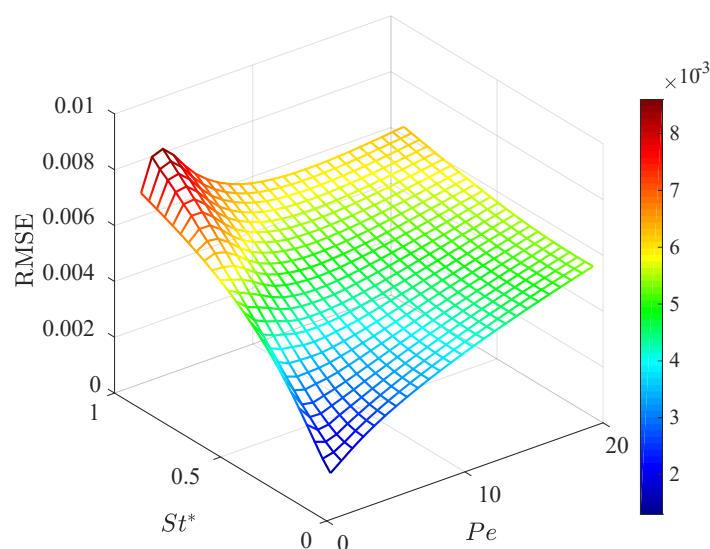


Figura 4: Superficie de respuesta para la raíz del error cuadrático medio. Fe-C utilizando la regla de la palanca.

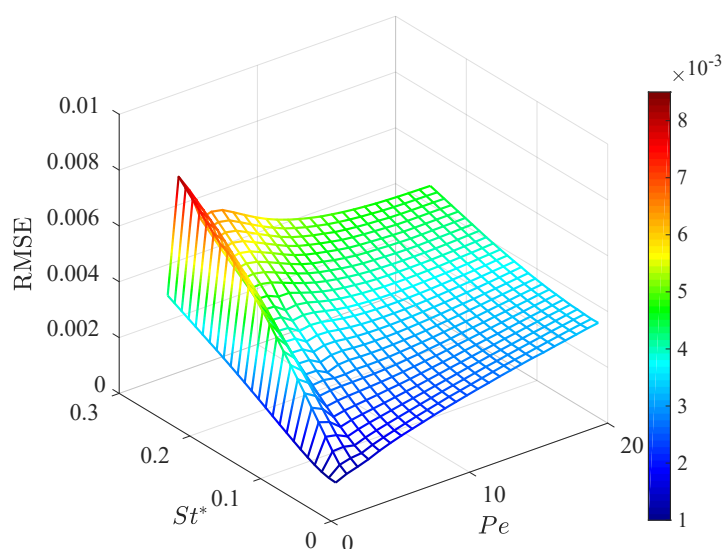


Figura 5: Superficie de respuesta para la raíz del error cuadrático medio. Al-Cu utilizando la regla de Scheil.

Este análisis demuestra la idoneidad de considerar propiedades físicas y de transporte constantes en la zona pastosa, utilizando la técnica del promedio ponderado propuesta por Chakraborty en el contexto de problemas de conducción de calor transitoria, la cual ahora se ha extendido a un problema de advección-conducción con cambio de fase sólido-líquido.

Estos resultados demuestran la validez de este enfoque incluso para rangos de solidificación muy amplios, que corresponden a los valores más altos de St . El rango de solidificación más amplio analizado para la aleación Fe-C fue de 108,03 K ($St = 0,94$), y para la aleación Al-Cu fue de 92,85 K ($St = 0,25$).

4. CONCLUSIONES

En este estudio se desarrolló una solución analítica para el problema unidimensional de advección-conducción con cambio de fase sólido-líquido no isotérmico, lo cual no tiene pre-

cedentes en la literatura revisada.

La formulación se basó en una técnica de promedio ponderado dependiente de la fracción sólida, que permite incorporar las variaciones de las propiedades térmicas dentro de la zona pastosa. Los resultados muestran una excelente concordancia (de error menor al 1 %) con simulaciones numéricas obtenidas mediante el método Galerkin libre de elementos (IEFG).

El modelo fue validado para una amplia gama de números de Péclet y Stefan, empleando tanto la regla de la palanca como la regla de Scheil, demostrando su robustez y aplicabilidad general sin depender de la composición o del mecanismo de transporte dominante.

En conjunto, el modelo propuesto ofrece una herramienta analítica útil y precisa para estudios preliminares de procesos de manufactura con cambio de fase, y puede servir para validar o comparar métodos numéricos más complejos.

REFERENCIAS

- Chakraborty S. y Dutta P. An analytical solution for conduction-dominated unidirectional solidification of binary mixtures. *Applied Mathematical Modelling*, 26(4):545–561, 2002. ISSN 0307904X. [http://doi.org/10.1016/S0307-904X\(01\)00073-7](http://doi.org/10.1016/S0307-904X(01)00073-7).
- Chung J., Lee J., Ro S., y Yoo H. Technical Note An analytical approach to the conduction-dominated solidification of binary mixtures. *International Journal of Heat and Mass Transfer*, 42(2):373–377, 1999. ISSN 00179310. [http://doi.org/10.1016/S0017-9310\(98\)00203-8](http://doi.org/10.1016/S0017-9310(98)00203-8).
- Hahn D.W. y Özişik M.N. *Heat conduction*. Wiley, Hoboken, N.J, 3rd ed edición, 2012. ISBN 9780470902936.