

# SOLUCION NUMERICA DEL PROBLEMA DE TRANSMISION DE CALOR CON CAMBIO DE FASE

LUIS A. CRIVELLI\*

y

SERGIO R. IDELSOHN\*\*

*Laboratorio de Mecánica del INTEC\*\*\**

*P. O. Box 91, 3000 - Santa Fe*

*Argentina*

## RESUMEN

Este trabajo resume el estado del arte de la solución numérica de los problemas de transmisión de calor con cambio de fase. Su objetivo consiste en presentar algoritmos en función de su capacidad de encarar problemas ingenieriles, dejando de lado los aspectos teóricos referidos a la convergencia de la solución numérica a la solución matemática clásica del problema. Se detallan las ventajas y desventajas de los diferentes esquemas para que se pueda efectuar la selección del método más conveniente para un problema determinado. Asimismo se indican cuáles son las tendencias de investigación actuales y las posibilidades futuras en el área. Se incluye una serie de ejemplos numéricos para remarcar los aspectos destacables de los métodos tratados en el trabajo.

## SUMMARY

This paper summarizes the state of the art of the numerical solution of phase-change problems. Its goal is to present algorithms capable to manage true engineering problems, leaving away any theoretical or mathematical aspect concerned with the convergence of the numerical solution to the classical mathematical one. It also present a scope of the advantages and disadvantages of the different methods in order to give a criterion for the selection of the proper algorithm for a given problem. Furthermore, there is an outlook on the present research tendencies and an envisage on the future possibilities. A number of numerical examples is included to clarify the main issues of the paper.

## INTRODUCCION

El creciente interés que están suscitando los problemas de transmisión de calor con cambio de fase se debe, más allá de los aspectos puramente teóricos, a la diversidad de campos tecnológicos y de investigación aplicada donde el fenómeno ocupa un rol preponderante. En efecto, los problemas de frontera móvil, conocidos como Problemas de Stefan, tienen lugar en muchas aplicaciones ingenieriles. En ingeniería de construcción y de minas es importante poder determinar el tiempo de congelamiento natural o artificial de ciertas regiones del suelo y la degradación de capas congeladas del mismo.

\* Becario del Consejo Nacional de Investigaciones Científicas y Técnicas de Argentina (CONICET)

\*\* Investigador del CONICET

\*\*\* Instituto de Desarrollo Tecnológico para la Industria Química, Univ. Nac. del Litoral y CONICET

Recibido: Marzo 1985

El estudio de solidificación de metales y aleaciones es de interés en metalurgia así como el análisis del proceso de formación de vidrios lo es para las cristalerías. En la generación nuclear de energía, su aplicación va desde estudios teóricos de reactores hasta aspectos específicos de seguridad de plantas nucleares como el tiempo de fusión de barras de combustible nuclear frente a diversos tipos de accidentes. El diseño de vehículos espaciales requiere la resolución de problemas de frontera móvil para el estudio de ablación y carbonización de las capas externas, protectoras de la estructura principal de los mismos, frente al shock térmico del reingreso en la atmósfera. En el aprovechamiento de la energía solar surgen problemas de cambio de fase al analizar los dispositivos de almacenamiento de calor. En efecto, la parte principal de estos equipos la constituye una sustancia de elevado calor latente en estado líquido, que se solidifica al requerírsele energía. Finalmente, en ciertos estudios cancerológicos se ha determinado que el grado de destrucción de células enfermas es función del contenido de oxígeno en los tejidos afectados. Este es otro tipo de problema de frontera libre donde la ecuación que gobierna el fenómeno es la ecuación de difusión. El resumen aquí presentado es de por sí escueto, ya que existen muchos más problemas de frontera libre relacionados con estudios climatológicos, geológicos y hasta astrofísicos planteados al analizar el comportamiento de sistemas estelares.

Al ser este problema esencialmente no lineal, debido fundamentalmente a la ecuación de movimiento de la interfase, se han obtenido muy pocas soluciones analíticas de valor<sup>1,4</sup>. Dada la importancia del mismo, se ha encarado su resolución a través de métodos numéricos<sup>5,7</sup> empleando tanto diferencias finitas<sup>8,21</sup> como elementos finitos<sup>22,43</sup>. Estos enfoques numéricos pueden dividirse en métodos de dominio fijo y métodos que persiguen la posición de la interfase. El principal inconveniente de estos últimos es que requieren cierta regularidad de la frontera móvil. Es por eso que algunos autores recomiendan los métodos de dominio fijo<sup>44,45</sup>, que contienen implícitamente la ecuación de movimiento de la interfase, originando las denominadas formulaciones débiles<sup>46,49</sup>. Dentro de esta familia de métodos existen diferentes estrategias como el uso de un calor específico equivalente, regularización de la relación temperatura-entalpía, métodos entálpicos, cambio de variable independiente o uso de una fuente de calor interna ficticia. Cada método específico puede abarcar un rango de problemas donde su comportamiento es adecuado en cuanto a la precisión de los resultados obtenidos.

## ECUACIONES FUNDAMENTALES

Nos referimos en lo que sigue de la exposición, y con el objeto de clarificar los conceptos, a la ecuación de transmisión de calor con cambio de fase. Consideraremos una región acotada  $\Omega$ , ocupada parcialmente por líquido, subregión  $\Omega_1$ , y parcialmente por sólido, subregión  $\Omega_2$ , donde una interfase  $\Gamma$  separa a ambas regiones. En la Figura 1 se esquematiza detalladamente este dominio. Las ecuaciones básicas que rigen este fenómeno son las de conservación de energía, conservación de masa y conservación de cantidad de movimiento. La complejidad resultante de tal formulación lleva a introducir una serie de hipótesis físicas adicionales con el fin de simplificar el problema, pero que a la vez no alteren la validez de la solución. Es así que se considera que

- La densidad de ambas fases es constante a través de la interfase.
- Cualquier efecto de convección en la fase líquida se tiene en cuenta aumentando el coeficiente de conductividad correspondiente.

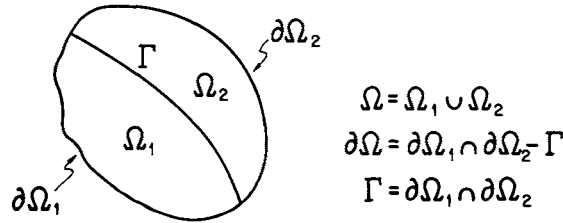


Figura 1.— Descripción del dominio bajo estudio.

El problema se reduce así a resolver en cada fase la ecuación de transmisión de calor

$$\nabla^T k \nabla T + Q = \rho \frac{\partial H}{\partial t} \quad \text{en } \Omega_i, i = 1, 2 \quad (1)$$

más la condición de equilibrio en la interfase

$$\mathbf{n}^T k_s \nabla T_s - \mathbf{n}^T k_l \nabla T_l = \rho (H_l - H_s) \mathbf{v}_\Gamma \quad (2)$$

sujeta a las condiciones de contorno

$$T = \bar{T} \quad \text{en } \partial\Omega_T \quad (3.1)$$

$$\mathbf{n}^T k \nabla T = \bar{q} \quad \text{en } \partial\Omega_q \quad (3.2)$$

y la condición inicial

$$T(\mathbf{x}, 0) = T_o(\mathbf{x}) \quad \text{en } \Omega \quad (3.3)$$

donde con  $\partial\Omega_T$  se indica la porción de  $\partial\Omega$  con temperaturas impuestas y con  $\partial\Omega_q$  la región con flujos impuestos. En las ecuaciones (1) a (3),  $k$  representará la conductividad térmica de cada fase,  $T$  la temperatura,  $Q$  es una fuente interna de calor, con  $\rho$  se indica la densidad,  $H$  es la entalpía específica,  $t$  es el tiempo,  $\mathbf{n}$  es el versor normal a la superficie y  $\mathbf{v}_\Gamma$  es la velocidad de la frontera libre. Además  $\bar{T}$  y  $\bar{q}$  indican valores impuestos de temperatura y flujo en la frontera y los subíndices  $s$  y  $l$  se refieren a las regiones sólida y líquida respectivamente.

Para una sustancia pura, cuyo cambio de fase ocurre a una temperatura fija  $T_m$ , la entalpía presenta una discontinuidad en dicha temperatura, cuyo salto es igual al calor latente  $L$ , siendo su expresión de la forma

$$H_{(T)} = \int_{T_r}^T [C + L \delta(\omega - T_m)] d\omega \quad (4)$$

donde  $\delta$  es la delta de Dirac,  $T_r$  es una temperatura de referencia, y  $c$  es el calor específico.

En caso de considerar que la temperatura de una de las fases es constante e igual a la temperatura de cambio de fase, estamos frente al problema de Stefan a una fase. Si suponemos además que sobre la frontera móvil puede existir un aporte adicional de calor  $q$ , podremos resolver el problema de ablación

$$\nabla^T k \nabla T + Q = \rho \frac{\partial H}{\partial t} \quad \text{en } \Omega_1$$

$$\mathbf{n}^T \mathbf{k}_s \nabla T_s = \rho(H_l - H_s) v_\Gamma + q \quad \text{en } \partial\Omega_q$$

Es interesante destacar que aún para aquellas sustancias que cambian de fase a una temperatura definida, para una combinación apropiada de la geometría y la fuente de generación interna, pueden surgir regiones de tamaño finito en donde, a la temperatura de cambio de fase, coexiste material en estado líquido con la fase sólida. Tales zonas se denominan en la literatura "mushy region"<sup>8,30</sup> o zona pastosa, por analogía con el caso de aleaciones.

Dado tanto el interés teórico del problema como la importancia práctica del mismo, una innumerable cantidad de métodos numéricos han sido propuestos para su resolución. Nos concentraremos aquí en los grandes grupos de métodos y rescataremos de cada uno de ellos a los que consideramos más representativos. Un intento global de clasificación de los métodos puede observarse en la Tabla 1. La división general está hecha entre los métodos que persiguen la interfase y los métodos de dominio fijo. En ambos grupos se consideran tanto esquemas de diferencias finitas como de elementos finitos.

PERSIGUEN A LA INTERFASE	DIFERENCIAS FINITAS EN MALLA FIJA DIFERENCIAS FINITAS EN MALLA VARIABLE ELEMENTOS FINITOS MOVILES ELEMENTOS DE CONTORNO
DOMINIO FIJO	CAPACIDAD CALORIFICA EQUIVALENTE FORMULACION ENTALPICA FUENTE INTERNA FICTICIA INDICE DE CONGELAMIENTO INTEGRACION DISCONTINUA

Tabla 1.— Métodos de Solución

## MÉTODOS QUE PERSIGUEN LA INTERFASE

### Diferencias finitas en Malla Fija

La idea básica del uso de diferencias finitas es reemplazar las derivadas de la función incógnita por fórmulas de diferencias evaluadas en determinados puntos de una malla dada. La interfase móvil, que en general yacerá entre dos nodos, puede ser tenida en cuenta a través de una modificación de las fórmulas de diferencias en la zona próxima a la misma. Para ello puede usarse un método de diferencias finitas modificadas considerando que los intervalos de separación entre nodos son diferentes cerca de la frontera entre las fases. Así expresado y con referencia a la Figura 2, en el caso unidimensional las fórmulas de diferencias para los nodos circundantes a la interfase resultan

$$\frac{\partial^2 T}{\partial x^2} = \frac{2}{\Delta x^2} \left( \frac{T_{i-1}}{\alpha+1} - \frac{T_i}{\alpha} + \frac{T_m}{\alpha(\alpha+1)} \right) \quad x = i\Delta x \quad (5)$$

$$\frac{\partial T}{\partial x} = \frac{1}{\Delta x} \left( \frac{\alpha}{\alpha+1} T_{i-1} - \frac{(\alpha+1)}{\alpha} T_i + \frac{(2\alpha+1)}{\alpha(\alpha+1)} T_m \right) \quad x \in \Gamma \quad (6)$$

Reemplazando la forma discreta del laplaciano (5) en la ecuación (1) y discretizando en forma explícita la derivada temporal, puede obtenerse la distribución de temperaturas en el dominio. Mediante la ecuación (6) puede evaluarse ahora el salto del gradiente en la interfase y calcular explícitamente la posición de la misma para el siguiente paso de tiempo. Obviamente es necesario que el movimiento de la interfase sea regular, no pudiendo tratar este algoritmo problemas con múltiples fronteras o aquellos casos donde la frontera degenera en una "zona pastosa".

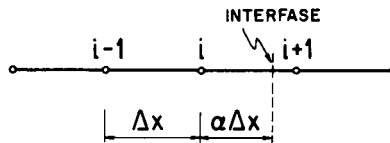


Figura 2.— Malla de diferencias finitas modificadas para el caso unidimensional.

**Malla Variable**

Este método se basa en mantener la interfase ubicada siempre en un nodo, deformando la malla con el movimiento de la frontera móvil. La cantidad de puntos entre la frontera del dominio y la interfase se mantiene constante. Al derivar la temperatura respecto del tiempo siguiendo la posición de un punto resulta

$$\frac{DT}{Dt} = \mathbf{v}^T \nabla T + \frac{\partial T}{\partial t} \tag{7}$$

siendo  $\mathbf{v}$  la velocidad de la malla en el punto considerado. En la ecuación (7), el primer término de lado derecho surge debido a la deformación de la malla y suele conocerse como término convectivo. Obtenido el gradiente de temperaturas en el nodo interfase puede calcularse la velocidad de la misma y su nueva posición procediendo luego a la actualización de la malla. Al mismo tiempo, hay que adoptar una estrategia para la deformación consecuente de la malla. En un problema unidimensional puede adoptarse una velocidad nodal proporcional a la velocidad de la frontera móvil, es decir

$$v_i = \frac{x_i}{s} v_\Gamma$$

resultando la ecuación a resolver de la forma

$$\frac{\partial T}{\partial t} + \frac{x_i}{s} v_\Gamma \frac{\partial T}{\partial x} = \frac{k}{\rho c} \frac{\partial^2 T}{\partial x^2}$$

donde  $s$  y  $x_i$  indican la posición de la interfase y del nodo  $i$  respectivamente.

Ambos algoritmos son eficientes en problemas unidimensionales en los cuales la adaptación de la malla es inmediata. No puede decirse lo mismo de su aplicación en problemas multidimensionales. Si bien para estos casos se han obtenido algunas extensiones de los métodos unidimensionales<sup>11</sup>, su elevada complejidad les resta utilidad práctica.

### Elementos Finitos móviles

La base del método de elementos finitos es la interpolación de la función incógnita a través de adecuadas funciones de forma que tienen soporte local<sup>50</sup>. En los problemas transitorios se supone válida la separación de variables entre funciones de forma que dependen de la posición y factores de participación de dichas funciones, conocidos como parámetros nodales, que dependen del tiempo.

$$T(\mathbf{x},t) = \sum_{i=1}^N N_i(\mathbf{x}) u_i(t) \quad (8)$$

donde con  $N_i(\mathbf{x})$  indicamos las funciones de forma y con  $u_i$ ,  $i = 1, \dots, N$  los  $N$  parámetros nodales asociados o grados de libertad. Ponderando con las mismas funciones de interpolación a la ecuación diferencial (1) y a la condición de contorno natural (3.2), integrando en todo el dominio y teniendo en cuenta la relación (4) para sustancias que no cambian de fase, se obtiene el sistema simétrico de ecuaciones de primer orden<sup>50</sup>

$$\mathbf{K} \mathbf{u} + \mathbf{C} \dot{\mathbf{u}} = \mathbf{g} \quad (9)$$

donde  $\mathbf{K}$  es la matriz de conductividad,  $\mathbf{C}$  es la matriz de capacidad,  $\mathbf{u}$  es el vector que colecciona los términos  $u_i$ ,  $\mathbf{g}$  es el vector de carga y el punto indica derivación respecto del tiempo.

En el caso de mallas deformables las funciones de forma dependerán también del tiempo, resultando la interpolación de la forma<sup>31,35</sup>

$$T(\mathbf{x},t) = \sum_{i=1}^N N_i(\mathbf{x},t) u_i(t)$$

Nuevamente, al derivar respecto del tiempo surge el término convectivo asociado a la deformación de la malla, equivalente al de la ecuación (7). Uno de los requisitos pedidos a las funciones de forma es que, para un punto dado, la misma no dependa del tiempo. Por lo tanto, su derivada material debe ser cero, lo que conduce a la relación

$$\frac{DN_i}{Dt} = - \nabla^T N_i \mathbf{v}$$

Así en la forma integral de la ecuación de transmisión de calor aparece la matriz convectiva, no simétrica, cuyo término característico resulta

$$K_{ij}^* = - \int_{\Omega} N_i \rho c \mathbf{v}^T \nabla N_j dv$$

obteniéndose el sistema de primer orden

$$(\mathbf{K} + \mathbf{K}^*) \mathbf{u} + \mathbf{C} \dot{\mathbf{u}} = \mathbf{g} \quad (10)$$

El paso siguiente es introducir una fórmula de diferencias para la variación temporal de la temperatura y otra para la velocidad de la interfase. Como la primera se integra en la ecuación (10), obteniendo la distribución de temperaturas en cada fase. Aplicando la ecuación (2) se calcula la velocidad de la interfase y con la fórmula de diferencias

para ésta, se puede obtener la nueva posición de la frontera móvil. De esta forma puede definirse una estrategia que combine diferentes tipos de algoritmos, por ejemplo, evaluación implícita de la distribución de temperaturas y determinación explícita de la posición de la interfase, o bien un esquema totalmente implícito.

Sin embargo es preciso notar que la velocidad de deformación de la malla ejerce un efecto que perturba la convergencia de este esquema<sup>35</sup>. Para asegurar la unicidad de la solución del sistema de ecuaciones, se debe garantizar el carácter definido positivo de la matriz de iteración. Esto introduce una limitación para la velocidad nodal máxima, inversamente proporcional al tamaño del elemento más chico.

No obstante, este algoritmo es de gran interés en problemas de ablación donde la capa degradada es removida por algún medio mecánico o químico, ya que la malla se adaptará siempre a la zona de material virgen<sup>35</sup>.

### Elementos Finitos de Contorno

Si asumimos que las propiedades de ambas fases son independientes de la temperatura, entonces la no linealidad estará concentrada en la interfase móvil. Por lo tanto puede resultar interesante una discretización que se centre exclusivamente en los contornos de ambas fases. Esto permitirá reducir el número de grados de libertad del problema, con la consiguiente reducción, prima facie, del costo global de la solución. Para ello puede recurrirse al uso de funciones de Green. Debido a la complejidad de establecer funciones de Green en el dominio espacio-tiempo, O'Neill<sup>22</sup> se ha interesado en la forma cuasiestática homogénea de la ecuación (1). La validez de esta suposición está respaldada en problemas para los cuales el número de Stefan es relativamente pequeño, es decir, cuando los efectos del calor latente son mucho más significativos que los del calor sensible y no hay fuente interna de generación. Entonces la ecuación diferencial (1) en cada fase, queda reducida a

$$\nabla^2 T = 0 \quad \text{en } \Omega_j \quad j = 1, 2$$

Las funciones de Green apropiadas resultan

$$G_i = \begin{cases} \ln r_i & \text{en 2-D} \\ 1/r_i & \text{en 3-D} \end{cases}$$

$$r_i = |\mathbf{r} - \mathbf{p}_i|$$

donde  $\mathbf{r}_i$  es el vector posición de un punto interior al dominio relativo al punto P (ver Figura 3), verificándose que

$$\nabla^2 G_i = \lambda_i \delta(\mathbf{r}_i)$$

En cada fase vale ahora la relación

$$\int_{\Omega_j} G_i \nabla^2 T dV = \int_{\partial\Omega_j} \left[ G_i \frac{\partial T}{\partial n} - T \frac{\partial G_i}{\partial n} \right] dS + \int_{\Omega_j} T \nabla^2 G_i dV = 0$$

siendo

$$\int_{\Omega_j} T \nabla^2 G_i dV = \lambda_i T_i$$

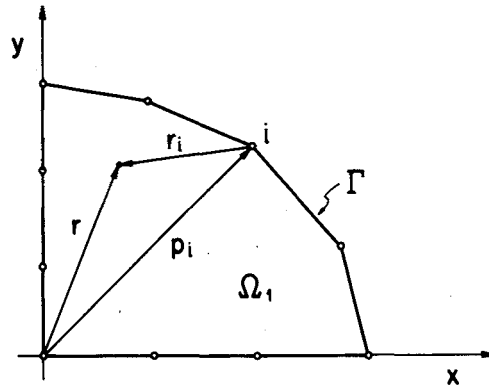


Figura 3.— Dominio discretizado con elementos de contorno.

donde

$$\lambda_i = \begin{cases} 2\pi & \text{p}_i \text{ interior a } \Omega_j \\ \pi & \text{p}_i \text{ sobre parte suave de } \partial\Omega_j \\ \theta & \text{p}_i \text{ sobre vértice de } \partial\Omega_j \text{ con ángulo interior } \theta \end{cases}$$

De esta manera sólo deben evaluarse integrales sobre el contorno, eliminando la integración en el interior del dominio. El siguiente paso consiste en discretizar la temperatura y su gradiente normal con funciones de forma cuya validez queda restringida únicamente a la frontera. En cada modo existirán dos grados de libertad y el sistema equivalente a la ecuación (8) resulta

$$T = \sum_{i=1}^N N_i(s) u_i \quad \text{se } \partial\Omega_j$$

$$\frac{\partial T}{\partial n} = \sum_{i=1}^N N_i(s) \frac{\partial u_i}{\partial n}$$

para obtener finalmente el sistema

$$A u = g$$

En los nodos donde la temperatura está impuesta se obtiene directamente el valor nodal del gradiente de temperaturas y viceversa. De esta forma y por aplicación de la ecuación (2) se puede calcular la velocidad de la interfase y su nueva posición.

Como contrapartida a la reducción del número de grados de libertad del problema, se tiene que ahora el sistema a resolver es completo, a diferencia de las matrices dispersas obtenidas en un problema de elementos finitos tradicional. También puede decirse que su aplicación es sencilla en problemas para los cuales las propiedades físicas no dependan de la temperatura, ya que para ecuaciones no lineales la determinación de las funciones de Green apropiadas no es tan directa.

#### Ventajas y Desventajas de los métodos que persiguen la interfase.

- Entre los puntos favorables de esta formulación podemos destacar
- En cada paso de tiempo se obtiene explícitamente la posición de la interfase.



- Al ser algoritmos orientados a un tipo particular de problema, generalmente resultan más eficientes que los métodos de dominio fijo.
- Como desventajas principales se enumeran entre otras
- Necesitan una solución de arranque.
- No pueden tratar zonas pastosas.
- No pueden tratar casos de degeneración de la interfase, aparición y/o desaparición de una nueva fase.
- La interfase debe ser una función regular.

### METODOS DE DOMINIO FIJO

El método consiste en resolver la ecuación diferencial original en el dominio completo  $\Omega$ . Esto conduce a una aparente contradicción matemática, ya que al ser el gradiente de temperaturas discontinuo en la interfase  $\Gamma$  que pasa por  $\Omega$ , la divergencia de la temperatura no está definida en todo el interior de dicho dominio. El fundamento de este enfoque lo constituyen las denominadas formulaciones débiles<sup>46,49</sup>. Estas consisten en una integración ponderada por funciones  $\phi(\mathbf{x},t)$  suficientemente regulares, de la ecuación diferencial original, lo que permite transferir las derivadas a dichas funciones. Apliquemos este procedimiento a la ecuación (1), la condición de interfase (2) y la condición de contorno natural (3.2), sumando para ambas fases, para obtener la ecuación integral.

$$\int_0^t \left[ \sum_{i=1}^2 \int_{\Omega_i} \left[ \phi \nabla^T (k \nabla T) + Q - \rho \frac{\partial H}{\partial t} \right] dV - \int_{\Gamma^{(t)}} \phi [n^T k_s \nabla T_s - n^T k_1 \nabla T_1 - \rho(H_k - H_s)v_{\Gamma}] ds - \int_{\partial\Omega_q} \phi (n^T k \nabla T - \bar{q}) ds \right] dt = 0 \quad (11)$$

Analícemos en particular la integral de volumen

$$\int_0^t \int_{\Omega_i} \left( \phi \nabla^T k \nabla T + Q - \rho \frac{\partial H}{\partial t} \right) dV dt \quad (12)$$

De la integración del término entálpico en (12) resulta

$$\int_0^t \left( \int_{\Omega_i} \phi \rho \frac{\partial H}{\partial t} dV \right) dt = \int_{\Omega_i} \phi(\mathbf{x},0) \rho H(\bar{T}) dV - \int_0^t \left( \int_{\Omega_i} \rho H \frac{\partial \phi}{\partial t} dV \right) dt - \int_0^t \left( \int_{\Gamma^{(t)}} \rho H v_{\Gamma} ds \right) dt \quad (13)$$

Debilitando el término de conducción en (11), aplicando Gauss y teniendo en cuenta la ecuación (13), obtenemos

$$\int_0^t \left[ \int_{\Omega} \left( -\nabla \phi k \nabla T + Q + \rho H \frac{\partial \phi}{\partial t} \right) dV + \int_{\partial\Omega_q} \phi \bar{q} ds \right] dt + \int_{\Omega} \rho \phi(\mathbf{x},0) H(\bar{T}) dV = 0 \quad (14)$$

Para resolver numéricamente este problema, se divide el intervalo de tiempo en  $M$  subintervalos de longitud  $\Delta t$ , llamando con  $t_n = n\Delta t$  a un punto arbitrario de la discretización temporal. Empleando un método de diferencias hacia atrás para aproximar la derivada temporal, la forma integral del problema (1)-(3) escrita para el instante  $t = t_n$ , resulta

$$\int_{\Omega} \left( -\nabla \phi k \nabla T_n + Q_n - \rho \frac{H_n - H_{n-1}}{\Delta t} \right) dV + \int_{\partial\Omega_q} \phi \bar{q}_n ds = 0 \quad (15)$$

donde el subíndice  $n$  indica valores en el instante  $t_n$ . Puede demostrarse que bajo ciertas hipótesis de regularidad, la solución de (15) converge a la forma débil (14) cuando el número de puntos del intervalo temporal tiende a infinito.

Dentro de este conjunto de algoritmos tenemos diferentes variantes, en función de las variables elegidas como primarias. Así podemos hacer la clasificación.

### Métodos basados en la elección de capacidad calorífica equivalente

Estos métodos discretizan la temperatura y tratan de recuperar la forma clásica de la ecuación de transmisión de calor (9). Para ello reemplazan el efecto del calor latente por una capacidad calorífica elevada válida en un pequeño rango de temperaturas, como muestra la Figura 4. Bonacina<sup>9</sup> propone el siguiente reemplazo

$$c_{eq} = \frac{L}{2\nu} + \frac{c_s + c_l}{2}$$

$$k_{eq} = k_s + \frac{k_l - k_s}{2} [T - (T_m - \nu)]$$

En las experiencias numéricas se ha observado que el resultado obtenido es relativamente independiente del parámetro de regularización  $\nu$  cuando se resuelve un problema a una fase, no siendo así para el caso más general de problemas de Stefan a dos fases, donde el tamaño de  $\nu$  afecta fuertemente a la solución.

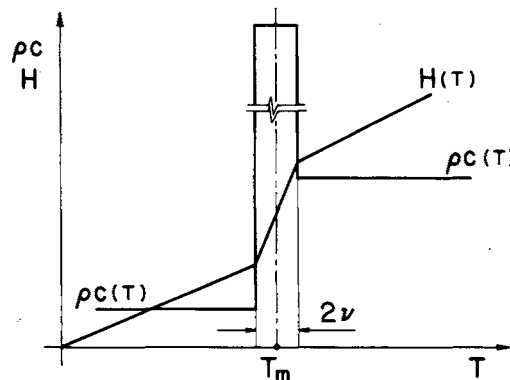


Figura 4.— Aproximación del efecto del calor latente por un calor sensible equivalente.

Comini et al.<sup>27</sup> adaptaron esta técnica al método de elementos finitos, obteniendo la capacidad equivalente a través de la derivación de la entalpía respecto de la tempera-

tura. La entalpía es interpolada dentro de cada elemento utilizando las mismas funciones de forma que para la temperatura. Para un problema bidimensional, la capacidad equivalente se obtiene como

$$c_{eq} = \frac{1}{2} \left[ \frac{\partial H / \partial x}{\partial T / \partial x} + \frac{\partial H / \partial y}{\partial T / \partial y} \right]$$

Posteriormente Morgan et.al<sup>28</sup> efectuaron una corrección a esta evaluación para evitar problemas de convergencia. Lemmon<sup>29</sup> también recomienda una técnica de este tipo, tanto para la capacidad calorífica como para una conductividad térmica equivalente.

El principal inconveniente de este enfoque es que el paso de integración temporal debe ser lo suficientemente pequeño para que la interfase no avance más de un elemento en cada paso de tiempo, de lo contrario, el calor latente de los elementos a través de los cuales pasó la interfase se pierde completamente.

Para contrarrestar este inconveniente Bathe y Kosgofaar<sup>23</sup> han propuesto un método que divide la región por la cual pasó la interfase en dos. En la primera reemplazan el efecto del calor latente por el de una fuente interna ficticia, equivalente al calor liberado o absorbido por los elementos que han cambiado de fase. En la segunda, utilizan una capacidad calorífica equivalente. De esta manera obtienen un mejor control del balance energético, pero el algoritmo pierde la simplicidad de los métodos de dominio fijo.

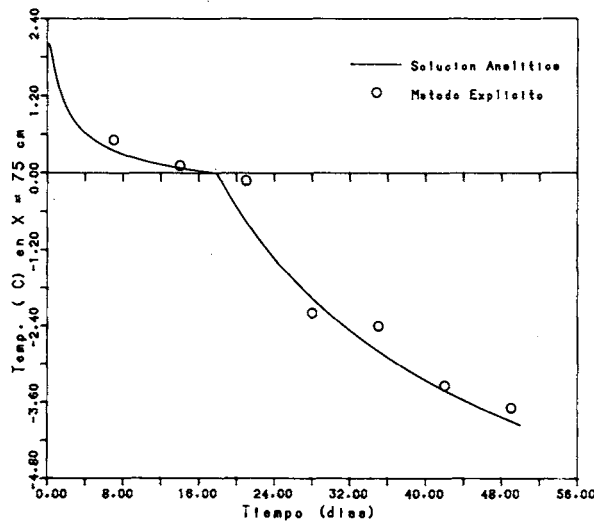


Figura 5.— Comparación entre la historia de temperaturas en un punto con la solución dada por un método explícito.

### Formulación entálpica

En este tipo de algoritmos, la entalpía es la variable primaria a discretizar, obteniéndose luego la temperatura en función de la relación inversa

$$\begin{aligned} T &= H/c & H < c T_m \\ T &= T_m & c T_m \leq H \leq c T_m + L \\ T &= (H-L)/c & H > c T_m + L \end{aligned}$$

Este método fue propuesto originariamente por Atthey<sup>8</sup>, empleando diferencias finitas en el espacio y planteando un esquema explícito para la integración temporal de la entalpía de la forma

$$H_m^{n+1} = H_m^n + \frac{k\Delta t}{\rho\Delta x^2} [T_{m+1}^n - 2T_m^n + T_{m-1}^n] + Q(T_m^n) \frac{\Delta t}{\rho}$$

donde los subíndices indican valores nodales y los índices valores temporales. Naturalmente el tamaño de paso está limitado por la condición de estabilidad de los esquemas explícitos

$$\frac{\Delta t}{\Delta x^2} < \frac{\rho c}{2k}$$

Este algoritmo puede modelizar perfectamente problemas donde la fuente interna de generación y las condiciones geométricas del problema originen la aparición de una zona "mushy", en la cual coexisten a la temperatura de fusión, material en estado líquido y en estado sólido. Por el contrario, según lo notado por Voller et.al.<sup>51</sup>, esta formulación origina plateaux artificiales en problemas donde la interfase debería ser abrupta, como se observa al dibujar la historia de temperaturas en un punto en la Figura 5. Esto se debe a que para la interfase avance a otro nodo es preciso que el calor total suministrado al nodo asociado al elemento por el que pasa la frontera móvil sea igual al calor latente necesario para fundir o solidificar completamente dicho volumen.

White<sup>19,20</sup>, presenta una variante implícita de este algoritmo. Meyers<sup>15</sup> propone el primer método implícito, regularizando la relación temperatura-entalpía en un intervalo  $2\nu$  de la forma

$$H(T) = \begin{cases} c_s T & T < T_m - \nu \\ H(T_m - \nu) + L/2\nu (T - T_m + \nu) & T \in [T_m - \nu, T_m + \nu] \\ H(T_m + \nu) + c_l (T - T_m - \nu) & T > T_m + \nu \end{cases}$$

Planteando para las derivadas segundas un esquema de diferencias se obtiene el sistema de ecuaciones algebraicas

$$\mathbf{A}(\mathbf{u}) + \mathbf{i}(\mathbf{u}) = 0$$

donde  $\mathbf{A}$  es el laplaciano discretizado e  $\mathbf{i}(\mathbf{u})$  es el vector correspondiente a la parte entálpica siendo  $\mathbf{u}$  el vector que colecciona las incógnitas nodales.

Meyers argumenta que los resultados obtenidos son relativamente independientes de la magnitud de  $\nu$ , pero los experimentos numéricos de Voller et.al.<sup>51</sup> prueban que tal resultado no se verifica, especialmente para valores pequeños de  $\nu$ .

Para mejorar el comportamiento de los métodos explícitos en cuanto a los plateaux artificiales de temperatura, Voller y Cross<sup>18</sup> proponen calcular el tiempo para el cual la interfase pasa por el nodo en cuestión. Para ello establecen que la temperatura del nodo es la de cambio de fase cuando la entalpía del mismo vale

$$H_i = cT_m + L/2$$

Entonces si

$$H_i^n > cT_m + L/2 \quad ; \quad H_i^{n+1} < cT_m + L/2$$

donde los supraíndices indican valores temporales, la interfase para por el nodo  $i$  para  $t_i = (n + \alpha) \Delta t$   
donde

$$\alpha = \frac{L/z + cT_m - H_i^n}{H_i^{n+1} - H_i^n}$$

recalculando las temperaturas mediante

$$T_i^{n+\alpha} = \alpha (T_i^{n+1} - T_i^n) + T_i^n$$

Bell<sup>52</sup> demuestra que este algoritmo es adecuado para puntos cercanos a la frontera externa del dominio, donde se impone la temperatura, pues la velocidad de variación de la entalpía es aproximadamente lineal, no siendo éste el caso para puntos alejados del contorno.

### Fuente interna ficticia

Consiste en reemplazar el efecto del calor latente por una fuente interna ficticia ubicada en aquellos elementos que cambian de fase. Bajo un esquema de Elementos Finitos este algoritmo ha sido propuesto inicialmente por Rolph y Bathe<sup>37</sup> y posteriormente por Roose y Storrer<sup>41</sup>. El sistema de ecuaciones de primer orden surgida de la discretización por Elementos Finitos (9), adopta la forma

$$C \dot{u} + k u - g + g_k = 0 \tag{16}$$

siendo  $g_k$  el término correspondiente a la fuente interna ficticia. Esta fuente interna tiene una duración dada por la cantidad de calor necesaria para fundir el elemento de volumen asociado a cada nodo del elemento. Este volumen asociado se considera desde el punto de vista de elementos finitos, es decir

$$V_i = \int_{\Omega} N_i dV = \sum_j \int_{\Omega_j^*} N_i dV$$

siendo  $\Omega_j^*$  cada uno de los elementos que concurren al nodo  $i$ . Dicha fuente ficticia se regula, para cada nodo, de la siguiente manera

$$\left. \begin{array}{ll} \text{si} & T_{n-1} > T_m \quad \text{y} \quad T_n^j < T_m \\ & \quad \quad \quad \text{ó} \quad \quad T_n^j < T_m \\ & T_{n-1} > T_m \quad \text{y} \quad T_n^j > T_m \end{array} \right\} \Rightarrow g_{k_\rho} = 0$$

$$\left. \begin{array}{ll} \text{si} & T_{n-1} < T_m \quad \text{y} \quad T_n^j \geq T_m \\ & \quad \quad \quad \text{ó} \quad \quad T_n^j \geq T_m \\ & T_{n-1} > T_m \quad \text{y} \quad T_n^j \leq T_m \end{array} \right\} \Rightarrow g_{k_\rho} = c \frac{T_m - T_n^j}{\Delta t} V_i$$

donde los índices indican la  $j$ -ésima iteración en el instante  $n$  para el nodo  $i$ . Esta fuente ficticia se suma en la ecuación (16) hasta que

$$\sum_{\ell} \dot{g}_{k\ell} = L V_i$$

### Índice de congelamiento

Este tipo de algoritmos se basan en la transformación de la variable independiente con el objeto de que la nueva variable sea continua y diferenciable en todo el dominio. Esta transformación fue introducida por Duvaut<sup>53</sup> y aplicada posteriormente por Fredmond<sup>54</sup>, Fredmond y Blanchard<sup>42</sup> y Kikuchi e Ichikawa<sup>39,40</sup> entre otros. La nueva variable se denomina índice de congelamiento y está definida por

$$M(\mathbf{x}, t) = \int_0^t K_i T(\mathbf{x}, t) dt$$

donde  $k_i$  es la conductividad de la fase a la que pertenece el punto  $\mathbf{x}$ . Si la conductividad es constante, entonces la temperatura puede obtenerse de la relación inversa

$$T = \frac{1}{k} \frac{dM}{dt}$$

Fredmond y Blanchard<sup>42</sup> regularizan la relación entalpía-temperatura en la zona de cambio de fase mediante una aproximación homográfica, para poder estudiar problemas con zonas mushy.

### Integración discontinua

Al discretizar mediante la ecuación (8) la temperatura y reemplazando ésta en la ecuación (15) se obtiene un sistema de ecuaciones que escrito matricialmente resulta

$$\mathbf{K}_n \mathbf{u}_n + \mathbf{i}_n(\mathbf{u}) = \mathbf{g}_n$$

donde  $\mathbf{i}$  es el vector de inercia térmica cuya expresión viene dada por

$$i_j = \int_{\Omega} \rho H(\mathbf{u}_n) N_j dv$$

Resolver este sistema es equivalente a obtener el vector  $\mathbf{u}$  que hace cero al residuo  $\mathbf{r}$ , es decir

$$\mathbf{r}(\mathbf{u}) = \mathbf{K} \mathbf{u} + \mathbf{i}(\mathbf{u}) - \mathbf{g} = \mathbf{0} \quad (17)$$

La base de este método<sup>43</sup> es tratar de obtener una evaluación más precisa de la ecuación de equilibrio. Para ello centra su atención en una mejor integración del término entálpico. En efecto, en los esquemas de elementos finitos es corriente emplear integración gaussiana para evaluar las integrales resultantes de la formulación. Cuando uno de los integrandos presenta una brusca variación dentro del elemento, como es el caso de la entalpía en los elementos por los que pasa la interfase, esta técnica de integración puede conducir a una mala evaluación del aporte del calor latente a la ecuación de equilibrio. La idea consiste entonces en dividir a los elementos por los que pasa la inter-

fase en dos elementos monofásicos para integrar la entalpía separadamente en cada uno de ellos. Es útil aquí el concepto de elemento isoparamétrico<sup>56</sup>, donde las integraciones se efectúan en un elemento máster, el cual puede subdividirse, transformando cada subregión sobre un nuevo master en donde se efectúan las integraciones. Para los elementos unidimensionales la posición de la interfase en el máster se obtiene de

$$\xi^* = 2 \frac{T_m - u_1}{u_2 - u_1} - 1$$

donde  $\xi^*$  es la coordenada en el elemento máster de la interfase y  $u_1$  y  $u_2$  representan la temperatura de los nodos extremos. Teniendo en cuenta que  $J$  es el jacobiano de la transformación isoparamétrica, las integraciones se realizan de la siguiente manera

Intervalo  $(-1, \xi^*)$

$$\int_{-1}^{\xi^*} \rho H N_i(\xi) \det J d\xi = \int_{-1}^{+1} \rho H N_i \left[ (\theta + 1) \frac{(\xi^* + 1)}{2} - 1 \right] \frac{\xi^* + 1}{2} \det J d\theta$$

Intervalo  $(\xi^*, 1)$

$$\int_{\xi^*}^{+1} \rho H N_i(\xi) \det J d\xi = \int_{-1}^{+1} \rho H N_i \left[ (\theta + 1) \frac{(1 - \xi^*)}{2} + \xi^* \right] \frac{1 - \xi^*}{2} \det J d\theta$$

Para el caso bidimensional la operatoria es más compleja pues la interfase puede dividirse al elemento según las opciones de la Figura 6. El elemento máster  $\Omega^m$ , se subdivide en dos submásters  $\Omega_1^m$  y  $\Omega_2^m$ . Por otra parte, la posición de la interfase se calcula según el caso

Opción 1

$$\xi_1^* = 2 \frac{T_m - u_1}{u_2 - u_1} - 1$$

$$\eta_1^* = -1$$

$$\xi_2^* = -1$$

$$\eta_2^* = 2 \frac{T_m - u_4}{u_1 - u_4} - 1$$

Opción 2

$$\xi_1^* = 2 \frac{T_m - u_1}{u_2 - u_1} - 1$$

$$\eta_1^* = -1$$

$$\xi_2^* = 2 \frac{T_m - u_4}{u_3 - u_4} - 1$$

$$\eta_2^* = +1$$

Evaluándose la integral correspondiente como

$$\begin{aligned} \int_{\Omega^e} \rho N_i H dV &= \int_{\Omega^m} \rho N_i (H - \pi(\mathbf{x})L) \det J dV + \pi(\mathbf{x}_3) \int_{\Omega^m} \rho N_i L \det J dV \\ &+ \int_{\Omega_1^m} \rho (\pi(\mathbf{x}_1) - \pi(\mathbf{x}_e)) L N_i \det J dV \end{aligned}$$

siendo  $\pi(\mathbf{x})$  una función tal que

$$\pi(\mathbf{x}) = \begin{cases} 0 & \text{si } T(\mathbf{x}) < T_m \\ 1 & \text{si } T(\mathbf{x}) \geq T_m \end{cases}$$

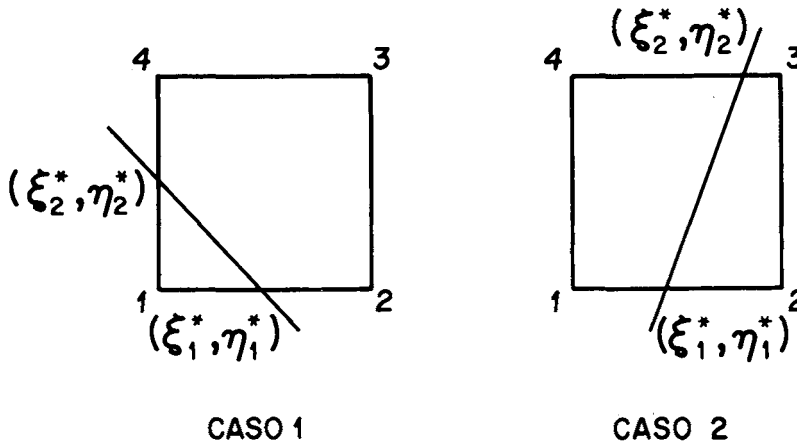


Figura 6.— Posiciones relativas de la interfase en un elemento cuadrangular.

### TECNICAS DE SOLUCION

Este problema está caracterizado por la no linealidad geométrica debida al movimiento de la interfase. Esta no linealidad es, desde el punto de vista práctico, mucho más importante que cualquier no linealidad en los coeficientes de cada una de las fases. Su efecto se hace sentir precisamente al tratar de resolver el sistema de ecuaciones que resultan de aplicar métodos implícitos o semiexplícitos. Algunos autores, especialmente los que usan métodos de diferencias finitas<sup>15</sup>, emplean un procedimiento de relajación sucesiva<sup>55</sup>. Blanchard<sup>42</sup> adopta un método de gradiente conjugado con preconditionante. Sin embargo, desde un punto de vista práctico, en códigos de elementos finitos es recomendable usar métodos incrementales<sup>37,56</sup> del tipo

$$\mathbf{S}(\mathbf{u}_n^j) \Delta \mathbf{u}_n^j = -\Gamma(\mathbf{u}_n^j) \quad (18)$$

$$\mathbf{u}_n^{j+1} = \mathbf{u}_n^j + \Delta \mathbf{u}_n^j$$

donde el índice indica el número de iteraciones en el instante  $t_n$  y  $\mathbf{S}$  es la matriz de iteración.

Uno de los inconvenientes que frecuentemente deben afrontar los esquemas iterativos desarrollados para resolver este problema, es que la temperatura en los nodos asociados a los elementos que cambian de fase puede presentar un comportamiento oscilatorio alrededor de la temperatura de cambio de fase. Esto es debido a que el movimiento de la interfase pone en juego un término de calor latente cuya contribución al residuo es de importancia. Este comportamiento puede incluso desestabilizar la convergencia. Es conveniente entonces emplear en las iteraciones iniciales una técnica de subrelajación para mejorar las condiciones de estabilidad. Posteriormente puede ser útil sobrerrelajar para mejorar la velocidad de convergencia. Una forma



automática de regular el parámetro de relajación consiste en utilizar un esquema de line search, donde se intenta minimizar la proyección del residuo en la dirección de búsqueda. Esto es, determinar el parámetro  $\sigma$  de modo que

$$\begin{aligned}\Delta \mathbf{u}^T \mathbf{r}(\mathbf{u}_n^j + \sigma \Delta \mathbf{u}_n^j) &= 0 \\ \mathbf{u}_n^{j+1} &= \mathbf{u}_n^j + \sigma \Delta \mathbf{u}_n^j\end{aligned}$$

También se ha sugerido<sup>13</sup> modificar la matriz de iteración de modo de controlar las oscilaciones espurias. Esto puede lograrse introduciendo la información que contiene el vector residuo dentro de la matriz tangente. Una forma sistemática para esto la proporcionan los esquemas de Quasi-Newton<sup>57,58</sup>. Estos se basan en encontrar una matriz  $G$  que satisfaga

$$\mathbf{Gd} = \mathbf{r}(\mathbf{u}) - \mathbf{r}(\bar{\mathbf{u}}) = \mathbf{y}$$

siendo  $\mathbf{u}$  y  $\bar{\mathbf{u}}$  dos puntos próximos y  $\mathbf{d} = \mathbf{u} - \bar{\mathbf{u}}$ . Una modificación de rango uno de la matriz de iteración puede leerse como

$$\mathbf{G} = \mathbf{S} + \frac{\mathbf{y} - \mathbf{Sd}}{\mathbf{e}^T \mathbf{d}} \quad (19)$$

donde  $\mathbf{e}$  es un vector arbitrario tal que  $\mathbf{e}^T \mathbf{d} \neq 0$ . En los esquemas de elementos finitos, las matrices tienen una característica dispersa, es decir, sólo los elementos ubicados en una zona próxima a la diagonal principal son no nulos. Una aplicación poco cuidadosa de la fórmula (19) puede conducir a matrices llenas con la consiguiente pérdida de eficiencia computacional. Para conservar la característica de la matriz de iteración y en particular no modificar su perfil activo, la modificación puede escribirse de la forma

$$\begin{aligned}\mathbf{G} &= \mathbf{S} + \sum_{i=1}^N \frac{\alpha_i \mathbf{f}_i \mathbf{d}_i}{\mathbf{f}_i^T \mathbf{d}_i} \mathbf{f}_i^T \\ \alpha_i &= y_i - \sum_{j=1}^N S_{ij} d_j\end{aligned}$$

donde  $\mathbf{f}_i$  es un vector cuyas componentes son todas nulas excepto la  $i$ -ésima.

Una forma clásica de determinar la convergencia del esquema iterativo es a través de la norma de la variación de temperaturas

$$\frac{\|\Delta \mathbf{u}\|}{\|\mathbf{u}\|} < \epsilon_u$$

donde  $\epsilon_u$  es la precisión requerida. Sin embargo en estos casos es conveniente medir cuán alejada del equilibrio está la solución numérica. Para ello es preciso acotar la norma del residuo de modo que

$$\frac{\|\mathbf{r}(\mathbf{u})\|}{\|\mathbf{K}\mathbf{u}\|} < \epsilon_r$$

## EJEMPLOS NUMERICOS

Se presentará a continuación una serie de ejemplos numéricos sencillos para clarificar los conceptos desarrollados. En principio, es útil destacar que existe cierta relación entre los parámetros de la discretización, es decir, el tamaño de la malla  $h$  y el incremento de tiempo  $\Delta t$ . Algunos trabajos matemáticos<sup>59,60</sup>, han buscado la relación óptima entre dichos parámetros para un orden de precisión dado de la solución. Nochetto<sup>59</sup>, trabajando con la forma adimensional de las ecuaciones (1) y (2) determinó que para que el orden de la solución sea  $h$ , el incremento de tiempo  $\Delta t$  debe ser del mismo orden que el tamaño de malla  $h$ , es decir

$$\Delta t^* \sim h^*$$

indicando con asterisco valores adimensionales de dichos parámetros.

## Solidificación de una barra semiinfinita

Estudiaremos la solidificación de una barra semiinfinita, cuya temperatura inicial es superior a la temperatura de fusión, y a la cual se la enfría bruscamente en un extremo según lo muestra la Figura 7. Este problema tiene por solución exacta la debida a Newmann<sup>1</sup> y el objetivo de este ejemplo es comparar el comportamiento de las soluciones numéricas frente a la variación de los parámetros de la discretización. Nos remitiremos a una barra utilizada en investigaciones previas<sup>37,43</sup>, cuyas propiedades físicas son

$$\begin{aligned} k_l = k_s &= 1.08 \text{ Kcal/m seg } ^\circ\text{C} & \rho c_s = \rho c_l &= 1 \text{ Kcal/m}^3 \text{ } ^\circ\text{C} \\ \rho \lambda &= 70.26 \text{ Kcal/m}^3 & T_m &= -1 \text{ } ^\circ\text{C} \\ T_o(x) = T(x,0) &= 0 \text{ } ^\circ\text{C} & T(0,t) &= -45 \text{ } ^\circ\text{C} \end{aligned}$$

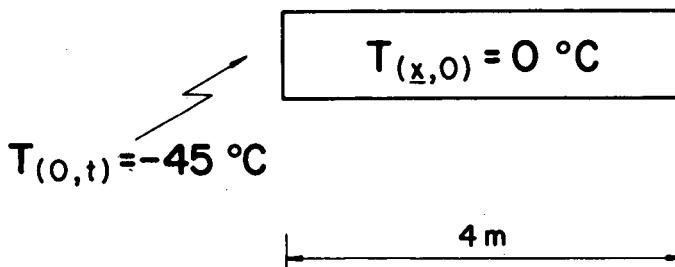


Figura 7.— Modelización de la barra semiinfinita.

Este problema se ha resuelto con un método de elementos finitos de dominio fijo, usando primero 8 elementos lineales y posteriormente con 32 elementos lineales equiespaciados a 0.5 cm y 0.125 cm respectivamente. El próximo paso es seleccionar el tamaño de paso temporal. Recientemente se ha propuesto una fórmula heurística<sup>43</sup> que relaciona los parámetros de la discretización de la siguiente manera

$$\Delta t \sim (\rho c D / k) \times h / \text{Ste} \quad (20)$$

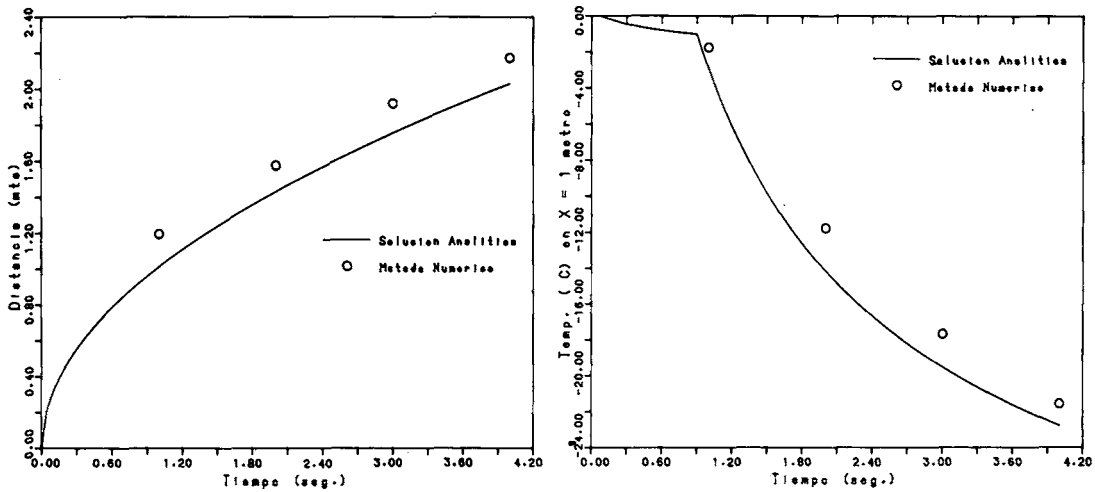


Figura 8.— Posición de la interfase e historia de temperaturas para la barra semiinfinita con 8 elementos y  $\Delta t = 1$  segundo.

donde  $D$  es una longitud característica. Para el primer caso, se obtiene un paso de tiempo recomendado de 1 segundo. En la Figura 8 se puede comparar la solución analítica para la posición de la interfase y para la temperatura en un punto de la barra, con la solución numérica. Si se resuelve el mismo problema, pero ahora con un paso de tiempo de 0.2 segundos, la posición de la interfase dada por la solución numérica prácticamente no se altera, sin embargo la predicción de la historia de temperaturas en un punto se vuelve imprecisa, como puede verse en la Figura 9. Más aún, el compor-

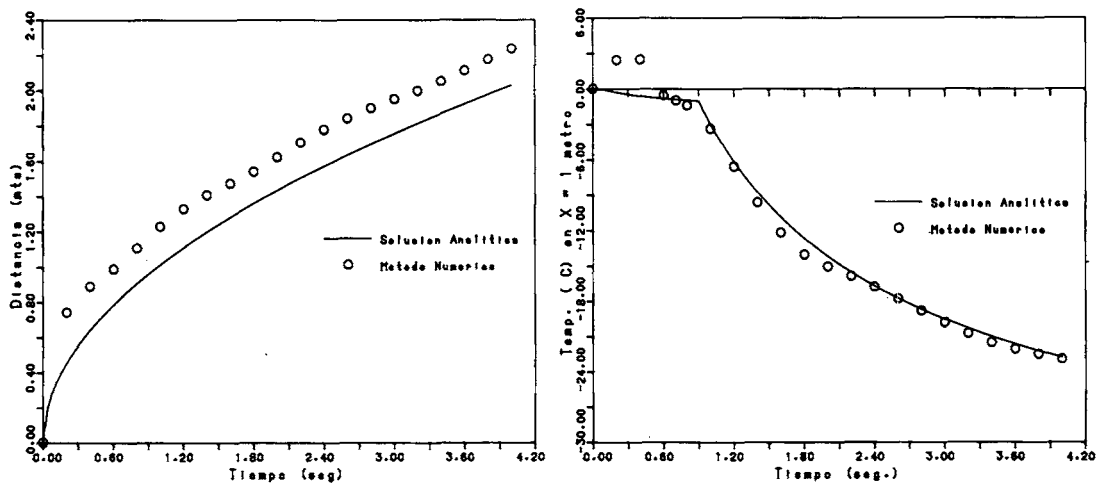


Figura 9.— Posición de la interfase e historia de temperaturas para la barra semiinfinita con 8 elementos y  $\Delta t = 0.2$  segundos.

tamiento es oscilatorio, adoptando incluso valores por encima del valor inicial. Esto puede interpretarse diciendo que la malla es demasiado gruesa para modelar los gradientes de temperatura que se producen en la zona de la interfase. Recurriendo a la fórmula (20), para un paso de 0.2 segundos, la malla apropiada es la de 32 elementos. Repitiendo los cálculos, los resultados graficados en la Figura 10 muestran que se obtiene la mejor predicción tanto en temperaturas como en posición de la interfase.

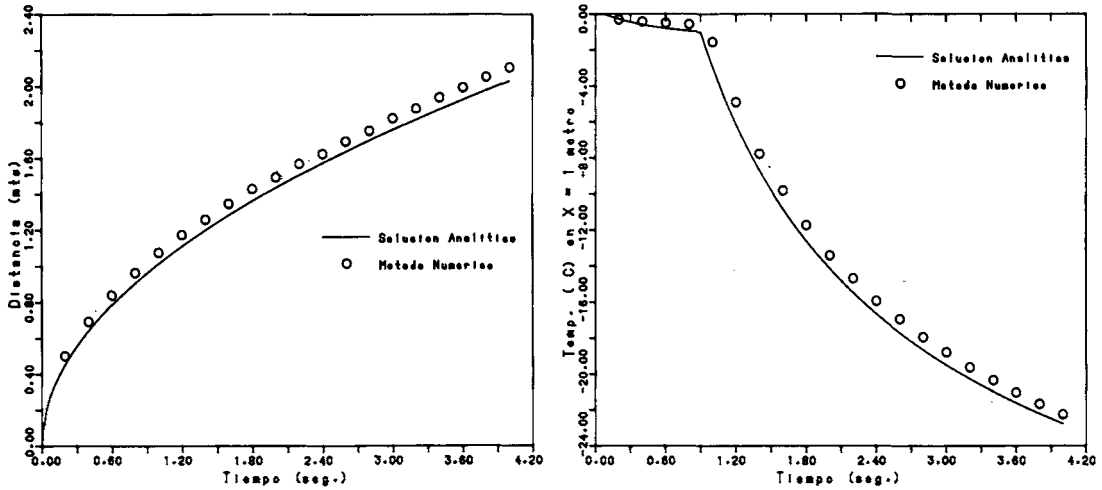


Figura 10.— Posición de la interfase e historia de temperaturas para la barra semiinfinita con 32 elementos y  $\Delta t = 0.2$  segundos.

### Problema degenerado con zona pastosa

Se presenta aquí un problema donde el cambio de fase está inducido fundamentalmente por una fuente interna en vez de una temperatura impuesta. El comportamiento de la solución puede cambiar radicalmente. Si bien para la forma homogénea de la ecuación (1) se ha demostrado que la interfase es necesariamente abrupta, es decir que no puede degenerar en una zona de dimensión finita cuya temperatura sea la de cambio de fase, cuando hay fuentes internas y la geometría de dominio es favorable, pueden aparecer lagunas o zonas pastosas donde existe material parcialmente fundido. Estos casos se conocen como problema de Stefan degenerado. Ejemplos típicos se encuentran al estudiar la soldadura de dos chapas superpuestas<sup>8</sup> y la fusión de barras de combustible nuclear<sup>30</sup>. Para detallar más estos conceptos analicemos el siguiente ejemplo adimensional. Consideremos una barra de longitud unitaria en cuyo interior una fuente  $Q$  genera calor según la ley

$$Q(x,t) = \begin{cases} 4t + 2 & x < \sqrt{2}t \\ 2 & \sqrt{2}t \leq x \leq \frac{1}{\sqrt{2}}(t+1) \\ \frac{6}{\sqrt{2}}\left(x - \frac{1}{\sqrt{2}}(t+1)\right) + 6 & x > \frac{1}{\sqrt{2}}(t+1) \end{cases}$$

Sean además la conductividad y el calor específico de la barra unitarios, el calor latente  $L=2$  y la temperatura de cambio de fase  $T=0$ . Este problema no resulta bien determinado conociendo únicamente la distribución inicial de temperaturas, es decir, necesita además la información del grado de fusión de cada uno de los puntos de la barra que estén a la temperatura de cambio de fase. Por lo tanto debe especificarse la distribución inicial de entalpía que para este ejemplo es

$$H(x,0) = \begin{cases} -2\sqrt{2}x + 1 & x \leq \frac{1}{\sqrt{2}} \\ 1 - 3\left(x - \frac{1}{\sqrt{2}}\right)^2 & x > \frac{1}{\sqrt{2}} \end{cases}$$

Con estos datos, la solución exacta del problema resulta

$$T(x,t) = \begin{cases} 2t^2 - x^2 & x < \sqrt{2}t \\ 0 & \sqrt{2}t \leq x \leq \frac{1}{\sqrt{2}}(t+1) \\ -3\left(x + \frac{1}{\sqrt{2}}(t+1)\right)^2 & x > \frac{1}{\sqrt{2}}(t+1) \end{cases} \quad (21)$$

Como puede notarse de la ecuación (21), surgen dos interfaces, la de comienzo de fusión y la de fin de fusión. Ambas interfaces pueden colapsar en algún momento, por ejemplo si desaparece la fuente interna. Obviamente este tipo de problemas no puede ser resuelto por algoritmos que persigan a la interfase. Para su solución numérica habrá que recurrir a un método entálpico o a un método de regularización. Con este segundo enfoque se ha obtenido la solución graficada en la Figura 11 con  $\nu = 0.05$  y 24 elementos unidimensionales.

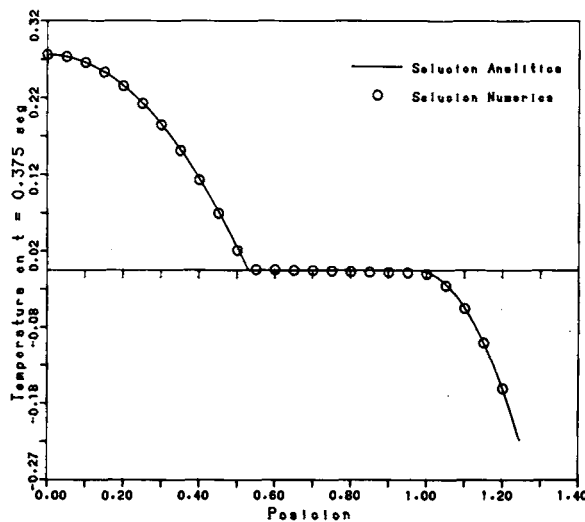


Figura 11.— Distribución de temperaturas en una barra finita con fuente interna de calor. En la misma se nota el tramo de temperatura constante que origina la zona pastosa.

### CONCLUSIONES Y FUTURAS DIRECCIONES DE INVESTIGACION

En este trabajo se han analizado los algoritmos numéricos de mayor uso en la simulación de problemas de cambio de fase, presentando sus ventajas y desventajas y se han mencionado algunas de las dificultades más corrientes que se encuentran al tratar de encarar la solución numérica. Puede agregarse que al diseñar algoritmos de propósito

general, es preferible el empleo de métodos implícitos ya que en problemas donde el número de Stefan es pequeño (problemas cuasiestáticos), la restricción sobre el tamaño de paso dada por los requisitos de estabilidad hace que los algoritmos explícitos se vuelvan económicamente ineficientes.

En general, al atacar un problema por primera vez, cuando se desconozca totalmente las características de la solución, son aconsejables los métodos de dominio fijo, ya que pueden tener en cuenta múltiples interfases, incluso la aparición y desaparición de una fase en el seno de la otra, pudiendo tratar además casos degenerados. Sin embargo, cuando existe una noción previa de la solución, ya sea por razonamientos físicos o por experiencia anterior, y ésta tenga la regularidad necesaria, un método que persigue a la interfase puede resultar más eficiente. Por otra parte, la ventaja de los métodos de este tipo es notoria al estudiar problemas donde la fase resultante desaparece o es removida, como es el caso de los problemas de ablación. No obstante, estos algoritmos generalmente necesitarán una solución de arranque.

La solución numérica de los problemas de cambio de fase no es un problema resuelto, sino que por el contrario es un campo de investigación creciente donde pueden producirse aún significativos progresos. En los métodos de malla móvil se necesitan algoritmos para controlar adecuadamente la deformación de la misma en dos y tres dimensiones, para movimientos arbitrarios de la interfase. También deben estudiarse con más detenimiento las condiciones para obtener convergencia, tratando de independizar a la misma de la velocidad de deformación de la malla. En los métodos de dominio fijo es necesario efectuar un análisis más detallado de los métodos iterativos empleados, tanto en lo referente a los aspectos de convergencia como en la eficiencia del esquema computacional. Expresado de otra manera, obtener métodos secantes del tipo representado por la ecuación (18), que garanticen la convergencia del esquema en el menor número posible de iteraciones. También es preciso entender con más detalle las relaciones óptimas entre los parámetros de la discretización. Sabiendo además que la zona crítica de la malla es la próxima a la interfase, la cual va variando con el tiempo, pueden intentarse algoritmos localmente adaptativos, es decir que permitan refinar la malla en la zona próxima a la singularidad. Finalmente se ha dicho que los métodos basados en la entalpía o en la regularización son apropiados para estudiar problemas degenerados, pero en los casos cuya solución es una interfase abrupta, originan zonas mushy artificiales, sin significado físico. Sin embargo, puede darse la situación de que en un dominio donde hay una zona pastosa real, ésta degenera posteriormente en una interfase abrupta o viceversa. Por lo tanto, sería de gran valor obtener algoritmos que puedan compatibilizar ambas situaciones.

#### REFERENCIAS

1. H. S. Carslaw y J. C. Jaeger. "Conduction of Heat in Solids" Oxford Univ. Press, (1959).
2. J. Rathjen y L. Jiji. "Heat conduction with melting or freezing in a corner" Trans. ASME *J. Heat Transfer* 93, 101-109, (1971).
3. L. Tao. "The exact solutions of some Stefan Problems with prescribed heat flux" Trans. ASME *J. Appl. Mechanics* 48, 732-736, (1981).
4. H. Budhia y F. Krieth. "Heat transfer with melting or freezing in a wedge" *Int. J. Heat Mass Trans.* 16, 195-211, (1973).
5. J. Crank. "How to deal with moving boundaries in thermal problems", en Numerical Methods in Heat Transfer (R. W. Lewis, K. Morgan y O. C. Zienkiewicz, Eds) Wiley, New York, (1981).
6. J. R. Ockendon y W. R. Hodgkins (eds). "Moving Boundary Problems in Heat Flow and Diffusion" Oxford Univ. Press, Oxford, (1975).

7. D. G. Wilson, A. D. Salomon y P. T. Boggs. "Moving Boundary Problems" Academic Press, New York, (1978).
8. D. R. Atthey. "A finite difference scheme for melting problems", *J. Inst. Math. Applics.* 13, 353-366, (1974).
9. C. Bonacina, G. Comini, A. Fasano y M. Primicerio. "Numerical solution of phase-change problems" *Int. J. Heat Mass Transfer* 16, 1825-1832, (1973).
10. L. E. Goodrich. "Efficient numerical technique for one-dimensional thermal problems with phase change" *Int. J. Heat Mass Transfer* 21, 615-621, (1978).
11. A. Lazardis. "A numerical solution of the multidimensional solidification (or melting) problem" *Int. J. Heat Mass Transfer* 13, 1459-1744, (1970).
12. J. George y P. Damle. "On the numerical solution of free boundary problems" *Int. J. Num. Meth. Engng.* 9, 239-245, (1975).
13. R. Gupta y D. Kumar. "A modified variable time step method for the one-dimensional Stefan Problem" *Comp. Meths. App. Mech. Engng.* 23, 101-109, (1980).
14. R. Gupta y D. Kumar. "Variable time step methods for one-dimensional Stefan Problems with mixed boundary conditions" *Int. J. Heat Mass Transfer* 24, 251-259, (1981).
15. G. H. Meyer. "Multidimensional Stefan problems" *Siam J. Numer. Anal.* 10, 522-538, (1973).
16. N. Schamsundar y E. M. Sparrow. "Analysis of multidimensional conduction phase change via the enthalpy model" *J. Heat Transfer* 97, 330-340, (1975).
17. A. Crowley. "Numerical solution of Stefan Problems" *Int. J. Heat Mass Transfer* 21, 215-219, (1978).
18. V. Voller y M. Cross. "Accurate solutions of moving boundary problems using the enthalpy method" *Int. J. Heat Mass Transfer* 24, 545-556 (1981).
19. R. E. White. "An enthalpy formulation of the Stefan problem" *Siam J. Numer. Anal.* 19, 1129-1157, (1982).
20. R. E. White. "A modified finite difference scheme for the Stefan problem" *Math. of Computation* 41, 337-347, (1983).
21. A. Wood, S. Ritchie y G. Bell. "An efficient implementation of the enthalpy method" *Int. J. Num. Meth. Engng.* 17, 301-305, (1981).
22. K. O'Neill. "Boundary integral equation solution of moving boundary phase change problems" *Int. J. Num. Meth. Engng.* 19, 1825-2850, (1983).
23. K. J. Bathe y M. R. Khoshgoftaar. "On finite element analysis of nonlinear heat transfer with phase changes" *Proc. Third Int. Conf. on Finite Elements in Water Resources*, Univ. of Mississippi, Oxford, 19-23, Mayo (1980).
24. R. Bonnerot y P. Jamet. "A second order finite element method for the one-dimensional Stefan Problem" *Int. J. Num. Meth. Engng.* 8, 811-820, (1974).
25. R. Bonnerot y P. Jamet. "Numerical computation of the free boundary for the two-dimensional Stefan problem by space-time finite elements" *J. Computational Phys.* 25, 163-181, (1977).
26. J. F. Ciavaldini. "Analyse numerique d'un probleme de Stefan a deux phases par un metode d'elements finis", *Siam J. Num. Anal.* 12, 464-487, (1975).
27. G. Comini, S. Del Giudice, R. W. Lewis y O. C. Zienkiewicz. "Finite element solution of nonlinear heat conduction problems with special reference to phase change" *Int. J. Num. Meth. Engng.* 8, 613-624, (1974).
28. K. Morgan, R. W. Lewis y O. C. Zienkiewicz. "An improved algorithm for heat conduction problems with phase change" *Int. J. Num. Meth. Engng.* 12, 1191-1195, (1978).
29. E. Lemmon. "Multidimensional integral phase change approximations for finite element conduction codes" en *Numerical Methods in Heat Transfer* (R. W. Lewis, K. Morgan y O. C. Zienkiewicz, Eds.) Wiley, New York, (1981).
30. S. Idelsohn y L. Crivelli. "Numerical Analysis of the fusion of nuclear combustible rods under loca-type accidents" *7mo Congreso Brasileiro de Engenharia Mecanica*, Uberlandia, Brasil, Diciembre 13-16, (1983).
31. D. Lynch y K. O'Neill. "Continuously deforming finite elements for the solution of parabolic problems, with and without phase change" *Int. J. Num. Meth. Engng.* 17, 81-96, (1981).
32. K. O'Neill y R. Lynch. "A finite element solution for freezing problems, using a continuously deforming coordinate system" en *Numerical Methods in Heat Transfer* (R. W. Lewis, K. Morgan y O. C. Zienkiewicz, Eds.) Wiley, New York, (1981).

33. D. Lynch. "Unified Approach to simulation on deforming elements with application to phase change problems" *J. Computational Physics* 47, 387-411, (1982).
34. P. Gerrekens, M. Hogge y G. Laschet. "Appropriate finite element techniques for heat transfer problems with high gradients and ablation" *Second International Conference on Numerical Methods in Thermal Problems*, Venecia, Italia, Julio 7-10, (1981).
35. M. Hogge y P. Gerrekens. "One-dimensional finite element analysis of thermal ablation with pyrolysis" *Comp. Meth. in Appl. Mech. Eng.* 33, 609-634, (1982).
36. M. Hogge y P. Gerrekens. "Two-dimensional deforming finite element methods for surface ablation" *AIAA 18th Thermophysics Conference*, Montreal, Canadá, Junio 1-3, (1983).
37. W. D. Rolph III y K. J. Bathe. "An efficient algorithm for analysis of nonlinear heat transfer with phase changes" *Int. J. Num. Meth. Engng.* 18, 119-134, (1982).
38. L. C. Wellford y R. M. Ayer. "A finite element free boundary formulation for the problem of multiphase heat conduction" *Int. J. Num. Meth. Engng.* 11, 933-943, (1977).
39. Y. Ichikawa y N. Kikuchi. "A one-phase multi-dimensional Stefan Problem by the method of variational inequalities" *Int. J. Num. Meth. Engng.* 14, 1197-1220, (1979).
40. N. Kikuchi y Y. Ichikawa. "Numerical methods for a two-phase Stefan Problem by variational inequalities" *Int. J. Num. Meth. Engng.* 14, 1221-1239, (1979).
41. J. Roose y O. Storrer. "Modelization of phase changes by fictitious heat flow" *Int. J. Num. Meth. Engng.* 20, 217-225, (1984).
42. D. Blanchard y M. Fremond. "The Stefan Problem: Computing without the free boundary" *Int. J. Num. Meth. Engng.* 20, 757-771, (1984).
43. L. Crivelli y S. Idelsohn. "A temperature-based finite element solution for phase-change problems" *Rep. Cuadernos de Matemática y Mecánica* 7, para ser publicado en *Int. J. Num. Meth. Engng.*
44. L. Fox. "What are the best numerical methods?" *en Referencia 4.*
45. G. H. Meyer. "The numerical solution of Stefan problems with front-tracking and smoothing methods" *App. Math. and Comp.* 4, 283-306, (1978).
46. C. M. Elliot y J. R. Ockendon. "*Weak and Variational Methods for Moving Boundary Problems*" Pitman, Boston, (1982).
47. A. Friedman. "The Stefan Problem in Several Space Variables" *Trans AMS* 133, 71-87, (1968).
48. S. L. Kamenomostskaja. "Sobre el Problema de Stefan" (En Ruso) *Mat. Sb.* 53, 489-514, (1961).
49. D. R. Atthey. "A finite difference scheme for melting problems based on the method of weak solutions" *en Referencia 4.*
50. O. C. Zienkiewicz. "*The Finite Element Method*" 3rd edn. Mc-Graw-Hill, Londres, (1977).
51. V. Voller, M. Cross y P. Walton. "Assessment of weak solution numerical techniques for solving Stefan Problems" *en Numerical Methods in Thermal Problems* (R. W. Lewis y K. Morgan, Eds) Pineridge Press, Swansea, U.K., (1979).
52. G. Bell. "On the performance of the enthalpy method" *Int. J. Heat Mass Transfer* 25, 587-589, (1982).
53. G. Duvaut. "The solution of a two-phase Stefan problem by a variational inequality" *en Referencia 4.*
54. M. Frenond. "Frost propagation in porous media" *en Computational Methods in Nonlinear Mechanics*, The Univ. of Texas at Austin, (1974).
55. J. M. Ortega y W. C. Rheinbolt. "*Iterative Solution of Non-linear Equations in Several Variables*" Academic Press, New York, (1970).
56. M. A. Hogge. "Secant versus tangent methods in nonlinear heat transfer analysis" *Second International Conference on Computational Methods in Nonlinear Mechanics*, TICOM, Univ. of Texas, Austin, Texas, Marzo 26-30, (1979).
57. M. Geradin, S. Idelsohn y M. Hogge. "Computational strategies for the solution of large nonlinear problems via quasi-Newton methods" *Comput. Structures* 13, 73-81, (1981).
58. M. Geradin, S. Idelsohn y M. Hogge. "Nonlinear structural dynamics via Newton and quasi-Newton methods" *Nucl. Engng. Des.* 54, 339-348, (1980).
59. R. H. Nochetto. "*Análisis numérico del problema de Stefan multidimensional a dos fases por el método de regularización*" Tesis Doctoral, Universidad de Buenos Aires, (1983).
60. J. Jerome y M. Rose. "Error estimates for the multidimensional two-phase Stefan problem" *Math. of Comp.* 39, 377-414, (1982).