

MODELOS MATEMATICOS EN SOLIDIFICACION: APLICACIONES EN METALUR-
GIA.

Alfredo Bermúdez de Castro

Dpto. de Ecuaciones Funcionales
Universidad de Santiago de Compostela

Abstract .- In this paper mathematical models for heat transfer with melting or solidification are considered. These models are variants of the well-known Stefan's problem which are of considerable interest in many fields as metal casting, nuclear reactor safety, purification of materials, etc.

INTRODUCCION.-

Los procesos de transmisión de calor con cambio de estado aparecen en numerosos campos de las ciencias aplicadas y la tecnología. A modo de ejemplo citemos la solidificación de coladas en metalurgia, la fusión del hielo y solidificación del agua, la purificación de materiales, la congelación de alimentos, el almacenamiento de la energía, etc.

Desde un punto de vista físico los fenómenos de transmisión de calor con cambio de estado difieren de los ordinarios por el hecho de que, mientras que en estos la entalpía es una función continua, en aquellos presenta una discontinuidad de salto en la superficie de separación de ambas fases.

Desde un punto de vista matemático, la dificultad fundamental estriba en que no se conoce a priori la evolución de esta superficie a lo largo del tiempo; se trata de un problema de "frontera libre".

Las diferentes formulaciones que se conocen responden al mismo objetivo: transformar las ecuaciones de partida, válidas en cada fase por separado, en una sola ecuación que tenga validez en la totalidad de la región ocupada por el cuerpo, con independencia de la posición de las fases.

Mayor dificultad se presenta cuando la temperatura de cambio de fase es variable y constituye una incógnita adicional del proble

ma. Así por ejemplo, en la solidificación de ciertas aleaciones dicha temperatura depende fuertemente de la concentración de soluto, cuya evolución está regida a su vez por otro conjunto de ecuaciones en derivadas parciales.

Por si fuera poco en el momento de la solidificación tiene lugar un rechazo de soluto (ó a veces de disolvente) de la fase sólida hacia la líquida. Por consiguiente la concentración no es continua y esto es fuente de nuevas dificultades como se verá más adelante.

En este artículo se presentan algunos modelos para la simulación (desde un punto de vista térmico) de procesos de cambio de estado. Asimismo se dan formulaciones que permiten el análisis matemático de los mismos y su resolución numérica.

El plan es el siguiente:

- 1.- El modelo de Stefan
- 2.- El modelo de Stefan con convección
- 3.- Problemas con dos materiales
- 4.- La solidificación de una aleación.

1.- El modelo de Stefan.

Con objeto de facilitar la comprensión vamos a considerar un ejemplo concreto: la solidificación del acero en colada continua (ver SAGUEZ-LARRECQ [1]). La figura 1 es una representación esquemática de una planta de colada continua. Si θ_S y θ_L designan la temperatura en las fases sólida y líquida, respectivamente, el modelo de Stefan establece que:

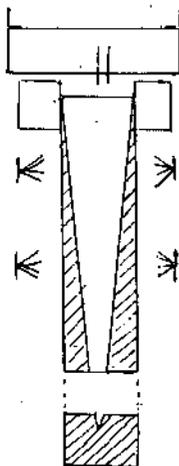


Fig. 1

En el sólido

$$(1.1) \rho(\theta_S)c(\theta_S) \frac{\partial \theta_S}{\partial \tau} - \sum_{i=1}^3 \frac{\partial}{\partial x_i} (k(\theta_S) \frac{\partial \theta_S}{\partial x_i}) + \rho(\theta_S)c(\theta_S) U \frac{\partial \theta_S}{\partial x_3} = 0$$

En el líquido

$$(1.2) \rho(\theta_L)c(\theta_L) \frac{\partial \theta_L}{\partial \tau} - \sum_{i=1}^3 \frac{\partial}{\partial x_i} (k(\theta_S) \frac{\partial \theta_S}{\partial x_i}) + \rho(\theta_L)c(\theta_L) U \frac{\partial \theta_L}{\partial x_3} = 0$$

En la superficie de separación

$$(1.3) \theta_S = \theta_L = \bar{\theta} \quad (\text{temperatura de solidificación}).$$

$$(1.4) k(\theta_S) \vec{\text{grad}} \theta_S \cdot \vec{N} - k(\theta_L) \vec{\text{grad}} \theta_L \cdot \vec{N} = \rho(\bar{\theta}) L \vec{V} \cdot \vec{N}$$

Siendo \underline{U} la velocidad de descenso de la colada, L el calor latente de fusión, \underline{V} la velocidad de avance de la interfase y $\underline{\bar{N}}$ un vector unitario normal a ésta.

A las ecuaciones (1.1)-(1.4) habría que añadir las condiciones de contorno y la condición inicial.

Si suponemos que el proceso se encuentra en estado estacionario los términos con derivadas temporales desaparecen. Además la transmisión de calor por conducción en la dirección de avance x_3 puede despreciarse frente a la que tiene lugar por convección de manera que las ecuaciones (1.1) (1.2) se reducen a

En el sólido

$$(1.5) \quad \rho(\theta_S)c(\theta_S)U \frac{\partial \theta_S}{\partial x_3} - \sum_{i=1}^2 \frac{\partial}{\partial x_i} (k(\theta_S) \frac{\partial \theta_S}{\partial x_i}) = 0$$

En el líquido

$$(1.6) \quad \rho(\theta_L)c(\theta_L)U \frac{\partial \theta_L}{\partial x_3} - \sum_{i=1}^2 \frac{\partial}{\partial x_i} (k(\theta_L) \frac{\partial \theta_L}{\partial x_i}) = 0$$

Nótese que (1.5) (1.6) son ecuaciones de tipo parabólico, por consiguiénte tomando como condición inicial (en $x_3 = 0$) la temperatura de vertido del acero, podemos integrarlas paso a paso y seguir la evolución de la temperatura de una sección en su descenso.

La ecuación (1.4) deberá sustituirse por

$$(1.7) \quad k(\theta_S) \sum_{i=1}^2 \frac{\partial \theta_S}{\partial x_i} \cdot n_i - k(\theta_L) \sum_{i=1}^2 \frac{\partial \theta_L}{\partial x_i} \cdot n_i = \rho(\bar{\theta})c(\bar{\theta})L U \underline{\bar{v}} \cdot \underline{\bar{n}}$$

donde $\underline{\bar{v}}$ es la velocidad de avance de la interfase en el plano x_1, x_2 respecto a x_3 y $\underline{\bar{n}} = (n_1, n_2)$ es un vector unitario en la dirección (N_1, N_2) .

Existen fundamentalmente tres formulaciones del problema de Stefan (1.5)-(1.7) que comentamos brevemente a continuación. Por las razones apuntadas más arriba escribiremos t en lugar de x_3 y $x = (x_1, x_2)$.

i) Formulación en temperatura. - Sea Ω el abierto de R^n ocupado por el material y $Q = \Omega \times]0, T[$. Para $t \in]0, T[$ se denotan $\Omega_S(t)$, $\Omega_L(t)$ los subconjuntos de Ω ocupados por las fases sólida y líquida respectivamente y se define en Q una función θ del siguiente modo:

$$(1.8) \quad \theta(x, t) = \begin{cases} \theta_S(x, t) & \text{si } x \in \Omega_S(t) \\ \theta_L(x, t) & \text{si } x \in \Omega_L(t) \end{cases}$$

Entonces, bajo ciertas hipótesis de regularidad y mediante fórmulas de Green no es difícil probar (ver LIONS [2]) que θ verifica

$$(1.9) \quad U \frac{\partial H(\theta)}{\partial t} - \operatorname{div} (k(\theta) \operatorname{grad} \theta) = 0$$

Siendo H el operador maximal monótono en R .

$$(1.10) \quad H(\theta) = \begin{cases} \int_0^{\theta} \rho(y) c(y) dy & \text{si } \theta < \bar{\theta} \\ \left[\int_0^{\bar{\theta}} \rho(y) c(y) dy, \int_0^{\bar{\theta}} \rho(y) c(y) dy + \rho(\bar{\theta}) L \right] & \text{si } \theta = \bar{\theta} \\ \rho(\bar{\theta}) L + \int_0^{\theta} \rho(y) c(y) dy & \text{si } \theta > \bar{\theta} \end{cases}$$

$H(\theta(x,t))$ representa la entalpía local del punto x en el instante t , de modo que (1.9) expresa algo evidente desde el punto de vista físico: la variación de entalpía local por unidad de tiempo es igual al calor que se transmite por conducción.

Es bien conocido que cuando el número de variables espaciales es superior a uno, la existencia de solución clásica del problema de Stefan es una cuestión abierta. Por este motivo numerosos autores han considerado una formulación débil obtenida a partir de (1.9), para la que prueban resultados de existencia y unicidad (ver OLEINIK [3], KAMENOMOSTSKAYA [4], LADYZENSKAYA-SOLONNIKOV-URALTCEVA [5], FRIEDMANN [6]).

Un problema más difícil es el de la regularidad de la solución débil y de la frontera libre. Aquí de nuevo los resultados obtenidos dependen de la dimensión espacial. Si ésta es uno y no hay fuentes de calor distribuidas (esto último ocurre en (1.9)), FRIEDMANN [7] ha probado la continuidad de la solución débil, y el mismo autor en [8] la analiticidad de la frontera libre.

En dimensión superior a uno los resultados que se conocen en este sentido, lo son para el llamado problema con una fase, que consiste en considerar que la temperatura en una de las fases es constante e igual a la temperatura de cambio de estado. En este caso FRIEDMANN-KINDERLEHRER [9] han demostrado un resultado de regularidad para la frontera libre y más recientemente CAFFARELLI-FRIEDMANN [10] la continuidad de la solución débil.

En cuanto a los métodos numéricos existen varios que parten de la formulación en temperatura. Dejando a un lado el caso unidimensional para el cual existe una abundante bibliografía, merece destacarse en primer lugar el artículo de KAMENOMOSTSKAYA [4] donde se prueba la convergencia del esquema explícito. Por su parte MEYER [11] considera un problema regularizado (obtenido al aproximar H por una familia de funciones continuas) para el que prueba la convergencia del esquema implícito.

También SAGUEZ-LARRECQ [1] discretizan en tiempo el problema mediante un esquema implícito, aunque sin regularización previa de la función H . En cada paso de tiempo resuelven la ecuación obtenida con un algoritmo de multiplicadores de BERMEDEZ-MORENO [12].

ii) Formulación en entalpía. - Es la que resulta de hacer en (1.9) el cambio de variable: $u = H(\theta)$. Si K denota la primitiva de λ que pasa por el origen se tiene:

$$(1.11) \quad U \frac{\partial u}{\partial t} - \Delta (K H^{-1}) u = 0$$

Esta formulación la utiliza por vez primera BREZIS [13] (ver también LIONS [2], BREZIS [14]). Más recientemente A. DAMIANIAN [15] ha considerado condiciones de contorno más generales y obtenido mayor regularidad. Sus resultados son aplicaciones de la teoría de semigrupos.

La resolución numérica de (1.11) se aborda en los artículos de CIAVALDINI [16], DEGUEIL [17], BREZIS-ROGERS-BERGER [18] etc.

iii) Formulación con inecuaciones variacionales. - Ha sido introducida por DUVAUT [19] para el problema con una fase y por DUVAUT [20] y FREDMOND [21], separadamente, para el problema con dos fases. En ambos casos se define una nueva incógnita ("grosso modo" la integral en tiempo de la temperatura) la cual es solución de una inecuación variacional de evolución de primera o segunda especie según que el número de fases sea uno o dos.

Resultados numéricos sobre esta formulación pueden verse en AGUIRRE-FREMOND [22], SAGUEZ [23].

2.- El modelo de Stefan con convección. (ver BERMUDEZ-SAGUEZ [24]).

El modelo (1.1)-(1.4) supone que la transmisión de calor en las direcciones x_1 ó x_2 se realiza solamente por conducción. Ahora bien existen casos (como el de la colada continua a nivel de la lingotera), en los que tienen lugar movimientos en la fase líquida que obligan a considerar la transmisión por convección, introduciendo en (1.2) un término suplementario. Procediendo de este modo, en lugar de (1.9) se obtiene la ecuación:

$$(2.1) \quad U \frac{\partial H(\theta)}{\partial t} - \operatorname{div} (k(\theta) \vec{\operatorname{grad}} \theta) + c(\theta) c(\theta) \vec{w} \cdot \operatorname{grad} (\theta - \bar{\theta})^+ = 0$$

En BERMUDEZ-SAGUEZ [24] se prueban resultados de existencia y unidad de solución para una ecuación de evolución no lineal que incluye a (2.1) como caso particular.

3.- Problemas con dos materiales.

Cuando una masa de metal fundido se enfría en un molde, la parte que solidifica en último lugar sufre una contracción debido al aumento de densidad, originándose una cavidad llamada "rechupe" (ver p. ej. RUDDLE [25]). Es de gran interés predecir la situación del rechupe con objeto de evitarlo o al menos desplazarlo a otro lugar, lo cual puede realizarse modificando el poder enfriador de ciertas partes del molde ó disponiendo "mazarotas" que alimenten de metal líquido las partes que solidifican en último lugar.

Veamos como el modelo de Stefan puede adaptarse para simular este proceso. Primeramente nótese que ahora nos interesa el fenómeno transitorio, así que no se podrán hacer las simplificaciones del §1, y por tanto, salvo casos especiales con ciertas simetrías (p. ej. en piezas cilíndricas), el dominio Ω será tridimensional.

Sean Ω_1 y Ω_2 las regiones ocupadas por el metal fundido y el molde, respectivamente, y $\Omega = \Omega_1 \cup \Omega_2$ (ver fig. 2).

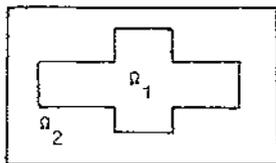


Fig. 2

La diferencia con los problemas en los que interviene un solo material es que ahora la entalpía depende no sólo de la temperatura sino también de x . Concretamente:

$$(3.1) \quad \text{si } x \in \Omega_1: H(x, \theta) = \begin{cases} \int_0^{\theta} \rho_1(y) c_1(y) dy & \theta < \bar{\theta} \\ \int_0^{\bar{\theta}} \rho_1(y) c_1(y) dy + \rho_1(\bar{\theta}) L & \theta = \bar{\theta} \\ \rho_1(\bar{\theta}) L + \int_0^{\theta} \rho_1(y) c_1(y) dy & \theta > \bar{\theta} \end{cases}$$

$$(3.2) \quad \text{si } x \in \Omega_2 \quad H(x, \theta) = \int_0^{\theta} \rho_2(y) c_2(y) dy$$

Otro problema con dos materiales, que surge en el estudio de reactores nucleares (ver EL GENK-CRONENBERG [26]), es el siguiente:

Se trata de transportar un líquido a alta temperatura, a través de una tubería construida con otro material cuyo punto de fusión es más bajo que el de solidificación del líquido. Se comprende que la región interior de la tubería va a fundirse, al tiempo que una capa de líquido en contacto con ella se solidifica. Para evitar la fusión total de la tubería, ésta se refrigera en su exterior con un líquido frío.

Como en el ejemplo anterior, la diferencia con el problema clásico de Stefan está en la función entalpía que ahora viene dada por:

$$(3.3) \quad x \in \Omega_i \quad H(x, \theta) = \begin{cases} \int_0^{\theta} \rho_i(y) c_i(y) dy & \theta < \bar{\theta}_i \\ \int_0^{\bar{\theta}_i} \rho_i(y) c_i(y) dy + \rho_i(\bar{\theta}_i) L_i & \theta = \bar{\theta}_i \\ \int_0^{\theta} \rho_i(y) c_i(y) dy + \rho_i(\bar{\theta}_i) L_i & \theta > \bar{\theta}_i \end{cases}$$

donde $\bar{\theta}_i$, L_i , ρ_i ($i=1,2$) designan, respectivamente, la temperatura de fusión, el calor latente y las regiones ocupadas por el líquido que se transporta ($i=1$) y la tubería ($i=2$).

4.- Solidificación de una aleación.

Como se ha dicho en la introducción, en este caso la temperatura de solidificación depende de la concentración de soluto (ver CHALMERS [27]). Denotando por C_S (resp. C_L) dicha concentración en la fase sólida (resp. líquida), se tendrá:

En el sólido

$$(4.1) \quad \frac{\partial C_S}{\partial t} - D_S \Delta C_S = 0 \quad (D_S: \text{coef. de difusión})$$

En el líquido

$$(4.2) \quad \frac{\partial C_L}{\partial t} - D_L \Delta C_L = 0 \quad (D_L: \text{coef. de difusión})$$

Además la concentración no es una función continua en la interfase: la composición del sólido que se forma difiere de la del líquido en equilibrio con él, como muestra el siguiente diagrama. Su interpretación es sencilla.

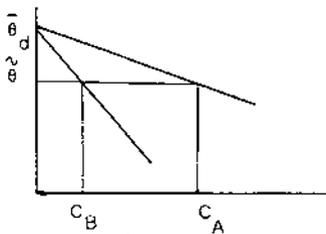


Fig. 3

Sea C_A la concentración de un punto de la aleación en estado líquido, que se enfría progresivamente. Cuando se alcance la temperatura $\bar{\theta}$, dicho punto se solidificará y, en ese momento, rechazará soluto hacia la zona líquida hasta que su concentración sea C_B .

Si $\frac{1}{\sigma_S}$ y $\frac{1}{\sigma_L}$ son las pendientes de las rectas de la figura, la ley de conservación de la masa impone la siguiente ecuación en la interfase:

$$(4.3) \quad D_S \overrightarrow{\text{grad}} C_S \cdot \vec{N} - D_L \overrightarrow{\text{grad}} C_L \cdot \vec{N} = (\sigma_S - \sigma_L) (g - \bar{\theta}_d) \vec{V} \cdot \vec{N}$$

donde $\bar{\theta}_d$ es la temperatura de solidificación del disolvente y g la temperatura a la que solidificará cada punto de Ω .

Para resolver (4.1)-(4.3), FIX [28] sugiere la introducción de la nueva función incógnita:

$$(4.4) \quad w = \begin{cases} w_S = \frac{C_S}{\sigma_S} + \bar{\theta}_d & \text{en la fase sólida} \\ w_L = \frac{C_L}{\sigma_L} + \bar{\theta}_d & \text{en la fase líquida} \end{cases}$$

que tiene un significado físico preciso " $w(x,t)$ es la temperatura a la que cambiaría de estado el punto x a la vista de la concentración que tiene en el tiempo t ". Por consiguiente, la interfase en el tiempo t será:

$$(4.5) \quad R(t) = \{x \in \Omega: \theta(x, t) = W(x, t)\}$$

y la función γ vendrá dada por:

$$(4.6) \quad g(x) = W(x, t) \quad \text{si } x \in R(t)$$

A partir de (4.1)-(4.3) no es difícil probar que W es solución de la ecuación

$$(4.7) \quad \frac{\partial G_\theta(W)}{\partial t} - \text{div}(M_\theta(W) \text{grad } W) = 0$$

donde G_θ y M_θ vienen dadas por:

$$(4.8) \quad G_\theta(W) = \begin{cases} -\sigma_L(W - \bar{\theta}_d) & \text{si } W < \theta \\ [-\sigma_L(\theta - \bar{\theta}_d), -\sigma_S(\theta - \bar{\theta}_d)] & \text{si } W = \theta \\ -\sigma_S(W - \bar{\theta}_d) & \text{si } W > \theta \end{cases}$$

$$(4.9) \quad M_\theta(W) = \begin{cases} -\sigma_L D_L & \text{si } W < \theta \\ -\sigma_S D_S & \text{si } W > \theta \end{cases}$$

Por otra parte la ecuación que rige la evolución de la temperatura continúa siendo (1.9) ó (2.1) (con $U=1$) pero la entalpía local es ahora función de W :

$$(4.10) \quad H_W(\theta) = \begin{cases} \int_0^\theta \rho(y)c(y)dy & \text{si } \theta < W \\ \left[\int_0^W \rho(y)c(y)dy, \rho(W)L + \int_0^W \rho(y)c(y)dy \right] & \text{si } \theta = W \\ \rho(W)L + \int_0^\theta \rho(y)c(y)dy & \text{si } \theta > W \end{cases}$$

La existencia de una solución para las ecuaciones (4.8) y (4.9) con H definida por (4.10), así como el desarrollo de métodos numéricos para su resolución con justificación matemática, parecen cuestiones abiertas. No obstante, con respecto a este último tema, las ideas contenidas en el artículo de FIX [28] junto con el algoritmo de BERMUDEZ-MORENO [12] para resolver problemas multivocos conducen a algoritmos convergentes como parecen indicar algunas experiencias realizadas con ordenador (BERMUDEZ-SAGUEZ [29]).

BIBLIOGRAFIA

- [1] C.SAGUEZ, M.LARRECQ. Controle de systèmes à frontière libre: Appli-
cation à la coulée continue d'acier. 4^{ème} Col. Int. sur
les Méthodes de Calcul Sc. et Technique. Versailles (1979).
- [2] J.L.LIONS. Quelques méthodes de resolution de problèmes aux limi-
tes nonlinéaires. Dunod. Paris (1969).
- [3] O.OLEINIK. A method of solution of the general Stefan problem. So-
viet Math. Dokl. 1 (1960) p. 1350-1354.
- [4] S.L.KAMENOMOSTKAYA. On Stefan's problem. Math. Sb. 53 (1965)
p. 485-514.
- [5] O.LADIZENSKAYA, V.SOLONNIKOV, N.URALTCEVA. Linear and quasilinear
equations of parabolic type. Transl. Math. Monographs,
vol. 23, A.M.S. Providence (1968).
- [6] A.FRIEDMANN. The Stefan problem in several space variables. Trans.
Amer. Math. Soc. 133 (1968), p. 51-87.
- [7] A.FRIEDMANN. One dimensional Stefan problems with nonmonotone free
boundary. Trans. Amer. Math. Soc. 133 (1968), p. 89-114.
- [8] A.FRIEDMANN. Analyticity of the free boundary for the Stefan problem.
Arch. Rat. Mech. and Analysis. 61 (1976), p. 97-125.
- [9] A.FRIEDMANN, D.KINDERLEHRER. A one phase Stefan problem. Ind. Univ.
Math. J. 24 (1975), p. 1005-1035.
- [10] L.CAFFARELLI, A.FRIEDMANN. Continuity of the temperature in the Ste-
fan problem. Ind.Univ.Math.J. 28 (1979), p. 53-70.
- [11] G.H.MEYER. Multidimensional Stefan problems. SIAM J. Num. Anal. 10
(1973), p. 522-538.
- [12] A.BERMUDEZ, C.MORENO. Duality methods for solving variational ine-
qualities. Comp. and Math. with. Appl. (1980).
- [13] H.BREZIS. On some degenerate parabolic equations. Proc.Symp. on non-
linear functional analysis. Chicago (1968) de Proc. Symp.
Pure Math. AMS (1970).
- [14] H.BREZIS. Monotonicity methods in Hilbert spaces and some applica-
tions to nonlinear partial differential equations. En Con-
tributions to nonlinear functional analysis. Ed. E.H.ZA-
RANTONELLO, Academic Press (1971).
- [15] A.DAMLAMIAN. Some results on the multi-phase Stefan problem. Commun.
Partial Differ. Eq. 2 (1977), p. 1017-1044.
- [16] J.CIAVALDINI. Analyse numérique d'un problème de Stefan à deux pha-
ses par une methode d'éléments finis. SIAM J. Num. Anal. 12
(1977).

- [17] A.DEGUEIL. Resolution par une methode d'elements finis d'un problème de Stefan en termes de temperature et teneur en materiau non gélé. Tesis 3^{er} ciclo. Univ. Bordeaux I (1977).
- [18] H.BREZIS, J.C.W.ROGERS, A.E.BERGER. A numerical method for solving the problem $u_t - \Delta f(u) = 0$.
- [19] G.DUVAUT. Resolution d'un problème de Stefan. C.R. Acad. Sci. Paris, 276 (1973), p. 1461-1463.
- [20] G.DUVAUT. Problèmes à frontière libre en théorie des milieux continus. Rapport du LABORIA n° 185 (1976).
- [21] M.FREMOND. Frost propagation in porous media. Int. Conf. on Comp. Methods in nonlinear Mechanics. Austin (1974).
- [22] J.AGUIRRE, M.FREMOND. Frost propagation in wet porous media en Applications of Methods of Functional Analysis in Mechanics. Lecture Notes in Mathematics n° 503. Springer.
- [23] C.SAGUEZ. Estudio de problemas con frontera libre: Simulación y control óptimo. Publicaciones del Dpto. de Ecuaciones Funcionales. Universidad de Santiago (1980).
- [24] A.BERMUDEZ, C.SAGUEZ. Une équation non-linéaire intervenant en solidification. (De próxima aparición).
- [25] R.W.RUDDLE. The solidification of castings. The Institute of Metals. London (1957).
- [26] M.S. EL-GENK, A.W.CRONENBERG. Stefan-like problems in finite geometry. AICHE Symp. Series. Heat Transfer-San Diego (1979).
- [27] B.CHALMERS. Principles of solidification. John Wiley New York (1964).
- [28] G.J.FIX. Numerical methods for alloy solidification problems. En Moving boundary problems. Ed. D.G.WILSON, A.D.SALOMON, P.T.BOGGS. Academic Press, New York (1978).
- [29] A.BERMUDEZ, C.SAGUEZ. Trabajo sin publicar.