SIMULACIÓN NUMÉRICA DE UNA COLADA DE ALUMINIO

A. Bermúdez[(1)] y M.V. Otero[(1)]

(1) Departamento de Matemática Aplicada, Universidad de Santiago de Compostela, 15706 Santiago, España.

En este trabajo se plantea un sistema de ecuaciones en derivadas parciales que modeliza el comportamiento térmico de una colada de aluminio, y a continuación se procede a su resolución numérica.

1 Problema físico

Durante el proceso de la colada del aluminio, tiene lugar la solidificación del mismo.
El aluminio líquido que sale de un horno se derrama sobre una canaleta que alimenta una *linea de colada*. Los principales elementos de una instalación de colada son: una linea de colada, el *molde* y el *falso fondo*.
El falso fondo es una plataforma situada en la parte inferior del molde que va descendiendo con una velocidad determinada a medida que avanza el tiempo.
En un primer momento, al comienzo del proceso, el falso fondo y el molde forman un recipiente sobre el que se derrama el aluminio líquido. El falso fondo va descendiendo, y el aluminio se solidifica forma una corteza que sirve de receptáculo al aluminio líquido que se derrama desde la canaleta.
La solidificación del aluminio se acelera gracias a dos tipos de refrigeración que actúan durante el proceso. El primer tipo, denominado *refrigeración primaria*, se produce mediante circulación de agua en el interior del molde. El segundo tipo, llamado *refrigeración secundaria*, tiene lugar cuando el agua que circula dentro del molde sale del mismo y entra en contacto con las paredes del lingote en formación.
El problema que se plantea es el estudio de la evolución de la temperatura en una sección del lingote a medida que esta va descendiendo con el tiempo.
Se trata, por tanto, de plantear y resolver un modelo para un problema de transferencia de calor con cambio de estado en un recinto bidimensional.
Lo más destacado de este fenómeno de cambio de estado es la existencia de una superficie de separación entre las fases sólida y líquida , conocida con el nombre de *interfase sólido-líquido*. El modo en que se mueve esta superficie es algo desconocido a priori. El calor se libera o absorbe en ella, y las propiedades térmicas a ambos lados de la superficie de separación son diferentes.
Los parámetros del material involucrados en el modelo son su densidad (ρ), su calor específico (c) y su conductividad térmica (k).
Por tratarse de un material homogéneo, ρ, c y k no dependen del punto de la sección que se considere, aunque sí pueden depender de la temperatura del material. En efecto, como se ha anunciado, las propiedades del material a uno y otro lado de la superficie de separación son diferentes. Por tanto ρ, c y k son funciones de la temperatura.

2 Modelo matemático

Se establece, a continuación, un modelo matemático para un problema de transferencia de calor con cambio de estado para el caso particular de un medio homogéneo e isótropo, en un dominio bidimensional, y sin tener en cuenta la convección en la fase líquida.
Sea Ω un dominio acotado que representa el interior de la sección, y $[0,t_f]$ el intervalo de tiempo en el que estudiamos el proceso de transmisión de calor.
Se denota por $\widetilde{T}(x,y,z,t)$ la temperatura de un punto $(x,y) \in \Omega$, cuando la sección ha alcanzado la altura z, en el instante de tiempo $t \in (0,t_f)$.
La colada va aumentando de tamaño en la dirección vertical, dependiendo de la velocidad de bajada del falso fondo. Por tanto, para un instante de tiempo $t \in (0,t_f)$, la posición vertical de la sección será $z(t)$.
Se define una nueva función T del modo siguiente

$$\begin{aligned} T: \quad & \Omega \mathrm{x}(0,t_f) \longrightarrow \mathbb{R} \\ & (x,y,t) \longmapsto T(x,y,t) = \widetilde{T}(x,y,z(t),t) \end{aligned} \tag{2.1}$$

Sea $[\theta_S, \theta_L]$ el rango de temperaturas en el que tiene lugar el cambio de estado. θ_S se denomina *Temperatura del Solidus* y θ_L *Temperatura del Liquidus*. Se analizan los siguientes casos por separado:

1. $\theta_S = \theta_L$
2. $\theta_S \neq \theta_L$

Se procede, seguidamente, al planteamiento de las ecuaciones del modelo en cada uno de estos casos.

2.1 $\theta_S = \theta_L$

Se definen los siguientes subconjuntos de Ω

$$\Omega_L(t) = \{(x,y) \in \Omega; T(x,y,t) > \theta_S\} \tag{2.2}$$

$$\Omega_S(t) = \{(x,y) \in \Omega; T(x,y,t) < \theta_S\} \tag{2.3}$$

que representan las partes de Ω ocupadas por líquido y sólido en el instante t, y a las que se llama *Fase Líquida* y *Fase Sólida* de Ω , respectivamente.
Si Q es el abierto de $\mathbb{R}^3$ dado por $Q = \Omega \mathrm{x}(0,t_f)$, se definen los siguientes subconjuntos de Q

$$Q_S = \bigcup_{t \in (0,t_f)} \Omega_L(t) \mathrm{x}\{t\} \subset Q \tag{2.4}$$

$$Q_L = \bigcup_{t \in (0,t_f)} \Omega_S(t) \mathrm{x}\{t\} \subset Q \tag{2.5}$$

Por último, si se denota por $S(t)$ la frontera de separación entre las fases sólida y líquida en el instante t, entonces, para T suficientemente regular, $S(t)$ viene dada por

$$S(t) = \{(x,y) \in \Omega; T(x,y,t) = \theta_S\} \tag{2.6}$$

Así, la frontera que separa las dos fases a lo largo del tiempo será

$$\Sigma = \bigcup_{t \in (0,t_f)} S(t) \mathrm{x} \{t\} \subset Q \tag{2.7}$$

Si denotamos por $T_S = T_{|_{Q_S}}$ y $T_L = T_{|_{Q_L}}$ las restricciones de la temperatura a la fase líquida y sólida por separado, en cada una de ellas se verifica una de las ecuaciones siguientes

$$\rho(T_S)c(T_S)\frac{\partial T_S}{\partial t} - \mathrm{div}\left(k(T_S)\,\vec{\mathrm{grad}}\,T_S\right) = 0 \quad \text{en } \Omega_S(t) \text{ c.p.d. en } (0,t_f) \tag{2.8}$$

$$\rho(T_L)c(T_L)\frac{\partial T_L}{\partial t} - \mathrm{div}\left(k(T_L)\,\vec{\mathrm{grad}}\,T_L\right) = 0 \quad \text{en } \Omega_L(t) \text{ c.p.d. en } (0,t_f) \tag{2.9}$$

En $S(t)$ tiene lugar la solidificación, es decir, el cambio de estado líquido a sólido y la temperatura coincide con la temperatura de cambio de estado

$$T_S = T_L = \theta_S \quad \text{en } S(t) \text{ c.p.d. en } (0,t_f) \tag{2.10}$$

$$k(T_S)\frac{\partial T_S}{\partial n} = k(T_L)\frac{\partial T_L}{\partial n} + L\,V.n \quad \text{en } S(t) \text{ c.p.d. en } (0,t_f) \tag{2.11}$$

donde L representa el *calor latente de fusión por unidad de volúmen* y V la *velocidad de avance de la interfase.*
Denotando por Γ la frontera exterior de Ω, y por n el vector unitario normal a Γ dirigido hacia el exterior de Ω, la condición de contorno sobre Γ se expresa del modo siguiente

$$k(T)\frac{\partial T}{\partial n} = \alpha(T_A - T) \quad \text{en } \Gamma \text{ c.p.d. en } (0,t_f) \tag{2.12}$$

siendo $\alpha : \Gamma \mathrm{x} (0,t_f) \longrightarrow \mathbb{R}$ un *coeficiente de transferencia de calor* en la superficie lateral, y donde $T_A : \Gamma \mathrm{x}(0,t_f) \longrightarrow \mathbb{R}$ denota la temperatura del agua que baña esta superficie lateral.
Por último, se supone conocida la temperatura en el instante $t = 0$, es decir

$$T(x,y,0) = T_0(x,y) \quad \text{en } \Omega \tag{2.13}$$

donde $T_0 : \Omega \longrightarrow \mathbb{R}$ es una función dada.
Tras realizar un razonamiento análogo al hecho por Durany en [5] (ver también [9]), se llega a la siguiente formulación del problema sobre todo el dominio Ω

$$\frac{\partial}{\partial t}H(T) - \mathrm{div}(k(T)\,\vec{\mathrm{grad}}\,T) \ni 0 \quad \text{en} \;\; Q \tag{2.14}$$

$$k(T)\frac{\partial T}{\partial n} = \alpha(T_A - T) \quad \text{en} \;\; \Gamma\mathrm{x}(0,t_f) \tag{2.15}$$

$$T(x,y,0) = T_0(x,y) \quad \text{en} \;\; \Omega \tag{2.16}$$

donde H es el operador multívoco definido del modo siguiente

$$H(T) = \begin{cases} \displaystyle\int_0^T \rho(s)\,c(s)\,ds = B(T) & \text{si } T < \theta_S \\ \displaystyle\left[\int_0^{\theta_S} \rho(s)\,c(s)\,ds\,,\int_0^{\theta_S} \rho(s)\,c(s)\,ds + L\right] & \text{si } T = \theta_S \\ \displaystyle\int_0^T \rho(s)\,c(s)\,ds + L = B(T) + L & \text{si } T > \theta_S \end{cases} \tag{2.17}$$

que físicamente representa la *entalpía por unidad de volúmen*.

2.2 $\theta_S \neq \theta_L$

En este caso, se llega una formulación del problema idéntica al caso anterior, salvo que la entalpía es una función unívoca de $\mathbb{R}$ en $\mathbb{R}$, continua, definida del modo siguiente

$$H(T) = \begin{cases} \displaystyle\int_0^T \rho(s)\,c(s)\,ds = B(T) & \text{si } T < \theta_S \\ \displaystyle\frac{L + \int_0^{\theta_L} \rho(s)c(s)\,ds - \int_0^{\theta_S} \rho(s)c(s)\,ds}{\theta_L - \theta_S}\,T & \\ \displaystyle+\frac{\theta_L \int_0^{\theta_S} \rho(s)c(s)\,ds - \theta_S \int_0^{\theta_L} \rho(s)c(s)\,ds - L\,\theta_S}{\theta_L - \theta_S} & \text{si } \theta_L < T < \theta_S \\ \displaystyle\int_0^T \rho(s)\,c(s)\,ds + L = B(T) + L & \text{si } T > \theta_S \end{cases} \tag{2.18}$$

2.3 Simulación de la conducción de calor en sentido vertical

La ecuación (2.14) representa, físicamente, que la variación local de entalpía se debe a la transmisión de calor por conducción en las dos direcciones horizontales.
En el modelo, se ha incorporado un término, que permite tener en cuenta la conducción

de calor en la dirección vertical.
El modelo resultante tras la incorporación de dicho término es el siguiente

$$\frac{\partial}{\partial t}H(T) - \operatorname{div}(k(T)\,\vec{\operatorname{grad}}\,T) = a(T_F - T) \quad \text{en } Q \tag{2.19}$$

$$k(T)\frac{\partial T}{\partial n} = \alpha(T_A - T) \quad \text{en } \Gamma\text{x}(0, t_f) \tag{2.20}$$

$$T(x, y, 0) = T_0(x, y) \quad \text{en } \Omega \tag{2.21}$$

donde a es un coeficiente de transferencia de calor en el falso fondo y T_F la temperatura del mismo.

3 Existencia de solución

En esta sección, se demuestra la existencia de solución de (2.19)-(2.21), utilizando un resultado de existencia de solución de ecuaciones de evolución no lineales planteado en un marco abstracto (ver [2] y [7]).

3.1 Planteamiento general

Sean V y H espacios de Banach separables, reflexivos, tales que $V \subset H$ con inyección compacta y V es denso en H. Identificando H con su dual se tiene

$$V \subset H \equiv H' \subset V'$$

Designaremos por $\| \ \|$ la norma en V y por $| \ |$ la norma en H.

- Sea Φ_A un funcional convexo continuo, $\Phi_A : V \longrightarrow \mathbb{R}$. Denotemos por $A = \partial\Phi_A$ la subdiferencial de Φ_A. Supongamos que

(1.1) A es acotado sobre los acotados de V.

(1.2) Se tiene la siguiente hipótesis de coercividad sobre A: existe $q \in \mathbb{N}, 1 < q < +\infty$ tal que

$$\liminf_{\|u\| \to +\infty} \frac{\Phi_A(u)}{\| u \|^q} > 0 \tag{3.1}$$

- Sea Φ_B un funcional convexo continuo, $\Phi_B : H \longrightarrow \mathbb{R}$, y $B = \partial\Phi_B$ su subdiferencial. Supongamos que B verifica la hipótesis siguiente:

(1.3) B es acotado sobre los acotados de H.

- f designa una función dada verificando:

$$(1.4)\ \ f \in L^{\infty}(0,t_f;V')\ ;\ \frac{df}{dt} \in^{q'} (0,t_f;V'),\ \frac{1}{q}+\frac{1}{q'}=1$$

Consideremos el problema (P) dado por:

$$\frac{d}{dt}(Bu) + Au \ni f \quad \text{en } \mathcal{D}\,'(]0,t_f[;V') \tag{3.2}$$

$$u(0) = u_0\,;\ (Bu)(0) = \xi \text{ con } u_0 \in V\,;\ \xi \in H \quad u_0 \text{ y } \xi \text{ dados, con } \xi \in Bu_0 \tag{3.3}$$

Se tiene el resultado de existencia (Grange-Mignot [7])

Proposicion 3.1 *Bajo las hipótesis (1.1)-(1.4), el problema (P) admite una solución en el sentido siguiente: Existen u y v tales que:*

$$u \in L^{\infty}(0,t_f;V) \tag{3.4}$$

$$v \in L^{\infty}(0,t_f;H);\quad \frac{dv}{dt} \in L^{\infty}(0,t_f;V') \tag{3.5}$$

$$\frac{dv}{dt} - f \in Au \quad c.p.d. \tag{3.6}$$

$$v(0) = \xi \ en\ V',\quad u(0) = u_0 \ en\ H \tag{3.7}$$

$$v(t) \in Bu(t) \quad c.p.d. \tag{3.8}$$

3.2 Hipótesis sobre los datos

Para demostrar que (2.19)-(2.21) verifica las condiciones de la proposición (3.1), se consideran las siguientes hipótesis sobre los datos:

(H.1) La conductividad $k : \mathbb{R} \longrightarrow \mathbb{R}$ es una función continua salvo a lo sumo en un número finito de puntos, acotada y tal que existen k_{min} y k_{max} constantes positivas verificando que $0 < k_{min} \leq k(s) \leq k_{max}\, \forall s \in \mathbb{R}$.

(H.2) $\rho \in L^\infty(\mathbb{R})$, $c \in L^\infty(\mathbb{R})$ y existen constantes $\rho_{min} > 0$, $c_{min} > 0$ tales que $0 < \rho_{min} \leq \rho(s)$, $0 < c_{min} \leq c(s)$ $\forall s \in \mathbb{R}$.

(H.3) θ_S, θ_L y L son constantes verificando $\theta_S \geq 0$, $\theta_L \geq 0$ y $L \geq 0$.

(H.4)
- $a \in L^\infty(\Omega)$ c.p.d. en $(0, t_f)$
- $T_F \in L^\infty(\Omega)$ c.p.d. en $(0, t_f)$
- $\alpha \in L^\infty(\Gamma)$ c.p.d. en $(0, t_f)$
- $T_A \in L^\infty(\Gamma)$ c.p.d. en $(0, t_f)$

(H.5)
- $a\, T_F \in L^\infty(0, t_f; L^2(\Omega))$
- $\alpha\, T_A \in L^\infty(0, t_f; L^2(\Gamma))$
- $\dfrac{d\,(a\, T_F)}{dt} \in L^2(0, t_f; L^2(\Omega))$
- $\dfrac{d\,(\alpha\, T_A)}{dt} \in L^2(0, t_f; L^2(\Gamma))$

(H.6) Existe una constante $a_{min} > 0$ tal que $a \geq a_{min}$ en Ω y c.p.d. en $(0, t_f)$.

(H.7) $\alpha \geq 0$ en Γ, c.p.d. en $(0, t_f)$.

(H.8) Existen constantes positivas M y N tales que:

$$| y | \leq Mx + N \quad \forall y \in (H \circ \beta^{-1})(x)\,, \quad \forall x \in \mathbb{R} \quad . \tag{3.9}$$

3.3 Aplicación al problema

Introducimos el siguiente cambio de variable en (2.19)-(2.21)

$$u = \beta \circ T \tag{3.10}$$

siendo β la *función de Kirchoff* definida mediante la expresión:

$$\beta(T) = \int_0^T k(s)\, ds \tag{3.11}$$

Por tanto, encontrar la solución de (2.19)-(2.21) equivale a encontrar $u = \beta(T)$ solución de

$$\frac{\partial (H\circ\beta^{-1})(u)}{\partial t} - \Delta u + a\beta^{-1}(u) = aT_F \quad \text{en } \Omega \tag{3.12}$$

$$\frac{\partial u}{\partial n} + \alpha\beta^{-1}(u) = \alpha T_A \quad \text{en } \Gamma \tag{3.13}$$

$$u(x,y,0) = u_0(x,y) = \beta(T_0(x,y)) \quad \text{en } \Omega \tag{3.14}$$

Multiplicando por una función test $v \in H^1(\Omega)$ en ambos miembros de la ecuación (3.12), integrando y aplicando la fórmula de Green, u es solución de

$$\frac{\partial}{\partial t}(Bu) + Au \ni f$$

donde

$$(A(u),v) = \int_\Omega \nabla u\,\nabla v\,dx\,dy + \int_\Gamma \alpha\beta^{-1}(u)\,v\,d\Gamma + \int_\Omega a\beta^{-1}(u)\,v\,dx\,dy \tag{3.15}$$

$$B(u) = (H\circ\beta^{-1})(u) \tag{3.16}$$

$$(f(t),v) = \int_\Omega aT_F\,v\,dx\,dy + \int_\Gamma \alpha\,T_A\,v\,d\Gamma \tag{3.17}$$

Bajo las hipótesis (H.1)-(H.8), se prueba la existencia de solución de (2.19)-(2.21), tomando $V = H^1(\Omega)$ y $H = L^2(\Omega)$.

4 Resolución numérica: Discretización

4.1 Semidiscretización en tiempo: Implícita

A continuación, se da una discretización temporal para (2.19)-(2.21) mediante un método en diferencias finitas implícito descentrado.
Se considera una partición Π del intervalo $[0,t_f]$ en N subintervalos de longitud $\Delta t = \dfrac{t_f}{N}$, es decir, $\Pi = \{0, \Delta t, 2\Delta t, \cdots, N\Delta t\}$.
Se denota por $T^{m+1} : \Omega \longrightarrow \mathbb{R}$ una aproximación de la temperatura T en el instante de tiempo $t_m = m\Delta t$.
Partiendo de e^o conocido se calcula T^{m+1} a partir de e^m, resolviendo el siguiente problema no lineal:

$$\frac{e^{m+1}-e^m}{\Delta t} - \operatorname{div}(k(T^{m+1})\vec{\operatorname{grad}}\,T^{m+1}) = a^{m+1}(T_F^{m+1} - T^{m+1}) \quad \text{en } \Omega \tag{4.1}$$

$$e^{m+1} \in H(T^{m+1}) \tag{4.2}$$

$$k(T^{m+1})\frac{\partial T^{m+1}}{\partial n} = \alpha^{m+1}({T_A}^{m+1} - T^{m+1}) \quad \text{en } \Gamma \tag{4.3}$$

donde $e^m \in H(T^m)$ se conoce del paso anterior, y a^{m+1}, T_F^{m+1}, α^{m+1}, T_A^{m+1} representan las funciones a, T_F, α, T_A en el instante de tiempo fijo $t_m = m\Delta t$.
Una formulación equivalente de (4.1)-(4.3) es

$$\frac{b^{m+1} - e^m}{\Delta t} - \operatorname{div}(k(T^{m+1})\vec{\text{grad}}\, T^{m+1}) = a^{m+1}T_F^{m+1} \quad \text{en } \Omega \tag{4.4}$$

$$b^{m+1} \in \left(H + \Delta t\, a^{m+1}\right)(T^{m+1}) \tag{4.5}$$

$$k(T^{m+1})\frac{\partial T^{m+1}}{\partial n} = \alpha^{m+1}({T_A}^{m+1} - T^{m+1}) \quad \text{en } \Gamma \tag{4.6}$$

Un resultado de estabilidad para este problema semidiscretizado en tiempo puede verse en [7].

4.2 Formulación variacional

Con el fin de utilizar a continuación un método de elementos finitos, se construye una formulación variacional del problema (4.4)-(4.6) .
Se considera como espacio de funciones test $V = H^1(\Omega)$.
Multiplicando ambos miembros de (4.4) por una función test $w \in V$, integrando sobre el dominio Ω y aplicando una fórmula de Green (ver [4]), resulta

$$\begin{aligned}
& \int_\Omega \frac{b^{m+1} - e^m}{\Delta t}\, w\, dx\, dy - \int_\Gamma \alpha^{m+1}({T_A}^{m+1} - T^{m+1})\, w\, d\Gamma \\
+ & \int_\Omega k(T^{m+1})\frac{\partial T^{m+1}}{\partial x}\frac{\partial w}{\partial x}\, dx\, dy + \int_\Omega k(T^{m+1})\frac{\partial T^{m+1}}{\partial y}\frac{\partial w}{\partial y}\, dx\, dy \\
= & \int_\Omega a^{m+1}T_F^{m+1}\, w\, dx\, dy \quad \forall w \in V
\end{aligned} \tag{4.7}$$

donde:

$$b^{m+1} \in \left(H + \Delta t\, a^{m+1}\right)(T^{m+1}) \tag{4.8}$$

Introducimos el cambio de variable de Kirchoff

$$u = \beta(T) = \int_0^T k(s)\,ds \qquad (4.9)$$

siendo β la *función de Kirchoff* definida en (3.11).
Sea u^{m+1} la función definida por

$$u^{m+1} = \beta \circ T^{m+1} \qquad (4.10)$$

Denotando por

$$d^{m+1} = \alpha^{m+1}\,\beta^{-1} \circ u^{m+1} \qquad (4.11)$$

obtenemos

$$\begin{aligned} & \int_\Omega \frac{b^{m+1} - e^m}{\Delta t}\, w\,dx\,dy + \int_\Omega \frac{\partial u^{m+1}}{\partial x}\,\frac{\partial w}{\partial x}\,dx\,dy \\ + & \int_\Omega \frac{\partial u^{m+1}}{\partial y}\,\frac{\partial w}{\partial y}\,dx\,dy + \int_\Gamma d^{m+1}\,w\,d\Gamma \qquad (4.12) \\ = & \int_\Gamma \alpha^{m+1} {T_A}^{m+1}\,w\,d\Gamma + \int_\Omega a^{m+1} {T_F}^{m+1}\,w\,dx\,dy \quad \forall w \in V \end{aligned}$$

$$b^{m+1} \in \left(\left(H + \Delta t\, a^{m+1}\right) \circ \beta^{-1} \circ u^{m+1}\right) \qquad (4.13)$$

donde e^m es conocido de la etapa anterior, puesto que $e^m \in (H \circ \beta^{-1})(u^m)$.
Mediante este cambio de variable, hemos conseguido eliminar la no linealidad debida a la variación de la conductividad con la temperatura.

4.3 Discretización espacial por elementos finitos

En este apartado, la formulación variacional (4.12)-(4.13) se aproxima mediante una discretización por un método de elementos finitos.
Asociado a una familia de triangulaciones τ_h del dominio Ω, se considera el subespacio de V de dimensión finita dado por

$$V_h = \{w_h \in C^0(\overline{\Omega});\; w_h/K \in P_1(K)\,\forall K \in \tau_h\} \qquad (4.14)$$

Este elemento finito posee 3 grados de libertad correspondientes a los valores en los vértices del triángulo.

Entonces, se introduce el problema discretizado como encontar, para t_m fijo, b_h^{m+1}, d_h^{m+1} y $u_h^{m+1} \in V_h$ verificando

$$\begin{aligned} & \int_\Omega \frac{b_h^{m+1} - e^m}{\Delta t} w_h \, dx \, dy + \int_\Omega \frac{\partial u_h^{m+1}}{\partial x} \frac{\partial w_h}{\partial x} \, dx \, dy \\ + & \int_\Omega \frac{\partial u_h^{m+1}}{\partial y} \frac{\partial w_h}{\partial y} \, dx \, dy + \int_\Gamma d_h^{m+1} \, w_h \, d\Gamma \\ = & \int_\Gamma \alpha^{m+1} {T_A}^{m+1} w_h \, d\Gamma + \int_\Omega a^{m+1} {T_F}^{m+1} w \, dx \, dy \quad \forall w_h \in V_h \end{aligned} \tag{4.15}$$

con

$$b_h^{m+1}(p) \in \left(\left(H + \Delta t \, a^{m+1}(p) \right) \circ \beta^{-1} \right) (u_h^{m+1}(p)) \tag{4.16}$$

para todo vértice p de la triangulación, y d_h^{m+1} es la función definida en Γ, constante por arista

$$d_h^{m+1}(A) = \alpha^{m+1}(m_A) \left(\beta^{-1} \right) (u_h^{m+1}(m_A)) \tag{4.17}$$

para toda arista A de la frontera Γ, donde m_A denota el punto medio de la arista A.
El problema aproximado o discretizado sigue siendo de tipo no lineal. Para calcular su solución, se propondrá un algoritmo iterativo en la siguiente sección.
En este trabajo no se realizan estimaciones de error para el método de elementos finitos utilizado en la discretización espacial. En Elliot [6], Nochetto-Verdi [11] y Nochetto [10] se dan estimaciones de error para problemas similares al que hemos tratado.

5 Algoritmo para la resolución del problema discretizado

El problema discretizado (4.15)-(4.17) constituye un sistema algebraico no lineal debido a la presencia del operador entalpía H, y de un término no lineal sobre la frontera.
Con el fin de eliminar ambas no linealidades, se utiliza un algoritmo iterativo planteado por Bermúdez y Moreno en [1].
Denotando por G el operador

$$G = \left(\left(H + \Delta t \, a^{m+1} \right) \circ \beta^{-1} \right) \tag{5.1}$$

resulta que las siguientes expresiones son equivalentes

i) $p_h^{m+1}(p) = b_h^{m+1}(p) - \omega u_h^{m+1}(p) \in G(u_h^{m+1}(p)) - \omega u_h^{m+1}(p)$

ii) $p_h^{m+1}(p) = G_\lambda^\omega(u_h^{m+1}(p) + \lambda p_h^{m+1}(p))$

donde G_λ^ω denota la regularizada Yosida de G.
Del mismo modo, son equivalentes

a) $q_h^{m+1}(A) = (\alpha^{m+1}\beta^{-1})\,(u_h^{m+1}(m_A))) - \xi u_h^{m+1}(m_A))$

b) $q_h^{m+1}(A) = (\alpha^{m+1}\beta^{-1})_\gamma^\xi\,(u_h^{m+1}(m_A)) + \gamma q_h^{m+1}(A))$

Gracias a ambas equivalencias, resulta natural plantear el siguiente algoritmo iterativo: En la iteración s, ${u_h^{m+1}}_{[s]}$, ${p_h^{m+1}}_{[s]}$ y ${q_h^{m+1}}_{[s]}$ son conocidos. Se calcula ${u_h^{m+1}}_{[s+1]}$ como solución del problema lineal

$$\begin{aligned}
&\frac{\omega}{\Delta t}\int_\Omega {u_h^{m+1}}_{[s]}\, w_h\, dx\, dy - \frac{1}{\Delta t}\int_\Omega e^m\, w_h\, dx\, dy + \int_\Omega \frac{\partial {u_h^{m+1}}_{[s]}}{\partial x}\frac{\partial w_h}{\partial x}\, dx\, dy \\
+ &\int_\Omega \frac{\partial {u_h^{m+1}}_{[s]}}{\partial y}\frac{\partial w_h}{\partial y}\, dx\, dy + \xi\int_\Gamma {u_h^{m+1}}_{[s]}\, w_h\, d\Gamma = \int_\Gamma \alpha^{m+1}\, {T_A}^{m+1}\, w_h\, d\Gamma \\
+ &\int_\Omega a^{m+1}\, {T_F}^{m+1}\, w_h\, dx\, dy + \frac{1}{\Delta t}\int_\Omega {p_h^{m+1}}_{[s]}\, w_h\, dx\, dy + \int_\Gamma {q_h^{m+1}}_{[s]}\, w_h\, d\Gamma \quad \forall w_h \in V_h
\end{aligned} \tag{5.2}$$

actualizando ${p_h^{m+1}}_{[s]}$ y ${q_h^{m+1}}_{[s]}$ mediante las expresiones

$${p_h^{m+1}}_{[s+1]}(p) = G_\lambda^\omega({u_h^{m+1}}_{[s]}(p) + \lambda {p_h^{m+1}}_{[s]}(p)) \tag{5.3}$$

para todo vértice p de la triangulación, y

$${q_h^{m+1}}_{[s+1]}(A) = (\beta^{-1})_\gamma^\xi({u_h^{m+1}}_{[s]}(m_A) + \gamma {q_h^{m+1}}_{[s]}(A)) \tag{5.4}$$

para toda arista A de la frontera Γ, siendo m_A el punto medio de la arista A.
En consecuencia, el problema se reduce a resolver en cada paso de tiempo y en cada iteración del algoritmo un sistema lineal. Nótese que la matriz del sistema no depende del paso de tiempo, ni de la iteración del algoritmo. Esto permite que, en la implementación, la matriz se pueda crear y factorizar fuera del bucle en pasos de tiempo y fuera del bucle en iteraciones.

6 Resultados numéricos

Este algoritmo ha sido implementado en ordenador mediante un código FORTRAN, y se ha validado con distintos ejemplos de los cuales se conoce la solución.
En este apartado se muestran los resultados obtenidos para un problema planteado por Ciavaldini en [3], comparando el orden de convergencia obtenido con los resultados dados por Jerome-Rose en [8].
Como dominio del problema consideramos el abierto $\Omega = (0,1)\text{x}(0,1)$. Supongamos que el intervalo de tiempo en el que estudiamos el proceso es $[0, t_f] = [0, 1/2]$, y que $\theta_S = \theta_L = 0$.
Definimos la siguiente función en Ω

$$T(x,y,t) = \left(x - \frac{1}{2}\right)^2 + \left(y - \frac{1}{2}\right)^2 - \frac{1}{4}e^{-4t} \quad 0 \le t \le \frac{1}{2}. \tag{6.1}$$

La interfase sólido-líquido viene dada por aquellos puntos $(x, y) \in \Omega$ y $t \in (0, 1/2)$ que verifican la siguiente expresión:

$$T(x,y,t) = \theta_S \Leftrightarrow \left(x - \frac{1}{2}\right)^2 + \left(y - \frac{1}{2}\right)^2 = \frac{1}{4}e^{-4t}. \tag{6.2}$$

Sean ρ, c y k funciones constantes a trozos definidas del modo siguiente

$$\rho(T) = \begin{cases} \rho_1 & \text{si } T \le \theta_S \\ \\ \rho_2 & \text{si } T > \theta_S \end{cases} \tag{6.3}$$

$$c(T) = \begin{cases} c_1 & \text{si } T \le \theta_S \\ \\ c_2 & \text{si } T > \theta_S \end{cases} \tag{6.4}$$

$$k(T) = \begin{cases} k_1 & \text{si } T \le \theta_S \\ \\ k_2 & \text{si } T > \theta_S \end{cases} \tag{6.5}$$

siendo $\rho_1 = \rho_2 = 1$, $c_1 = 2$, $c_2 = 6$, $k_1 = 1$ y $k_2 = 2$.
En las fases líquida y sólida por separado se verifica

$$\rho_1 c_1 \frac{\partial T}{\partial t} - k_1 \left(\frac{\partial^2 T}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 T}{\partial y^2}\right) = c_1 e^{-4t} - 4k_1 \quad \text{si } T < \theta_S \tag{6.6}$$

$$\rho_2 c_2 \frac{\partial T}{\partial t} - k_2 \left(\frac{\partial^2 T}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 T}{\partial y^2}\right) = c_2 e^{-4t} - 4k_2 \quad \text{si } T > \theta_S. \tag{6.7}$$

En la interfase sólido-líquido se verifica

$$T(x,y,t) = 0 \tag{6.8}$$

$$k_1 \frac{\partial T}{\partial n} = k_2 \frac{\partial T}{\partial n} + L\, V.\, n \tag{6.9}$$

donde L es el calor latente de fusión, que tomaremos igual a 1.
Se supone que el coeficiente de transferencia de calor en el falso fondo es constante e igual a 0 en Ω x $(0, t_f)$.
Entonces, T definido en (6.1) es solución de

$$\frac{\partial}{\partial t} H(T) - div\left(k(T)\, gr\vec{a}d\, T\right) = f \tag{6.10}$$

donde f representa las fuentes de calor internas y viene dada por

$$f(x,y,t)=\begin{cases} c_1 e^{-4t}-4k_1 & \text{si } \left(x-\frac{1}{2}\right)^2+\left(y-\frac{1}{2}\right)^2\leq \frac{1}{4}e^{-4t} \\ \\ c_2 e^{-4t}-4k_2 & \text{si } \left(x-\frac{1}{2}\right)^2+\left(y-\frac{1}{2}\right)^2 > \frac{1}{4}e^{-4t}. \end{cases}$$

siendo $(x,y)\in\Omega$ y $t\in(0,t_f)$.
El coeficiente de transferencia de calor en la superficie lateral se toma constante e igual a 1 en Γ x $(0,t_f)$.
Entonces, tras un cálculo inmediato, resulta que para que se verifique la condición de contorno en Γ x $(0,t_f)$

$$k(T)\frac{\partial T}{\partial n}=\alpha\,(T_A-T) \tag{6.11}$$

la temperatura del agua en la superficie lateral debe ser

$$T_A(x,y,t)=2\left(x-\frac{1}{2}\right)\,n_1+2\left(y-\frac{1}{2}\right)\,n_2+T(x,y,t) \tag{6.12}$$

siendo $(n_1,\,n_2)$ el vector normal unitario a la frontera Γ y exterior a Ω en cada punto.
Por último, la velocidad de bajada de la placa se toma constante $v\equiv 1$ en el intervalo $(0,t_f)$.
Gracias a la simetría del problema, en lugar de considerar el dominio $\Omega=(0,1)$ x $(0,1)$, se considera un nuevo dominio $\Omega_o=(0,1/2)$ x $(0,1/2)$, lo cual supone un gran ahorro computacional tanto en tiempo de cálculo como en memoria utilizada.
Esto obliga a distinguir dos partes en la frontera del dominio Ω_o:

1. $\Gamma_1\cup\Gamma_2$, parte de la frontera donde la condición de contorno viene dada por:

$$k(T)\frac{\partial T}{\partial n}=\alpha(T_A-T) \tag{6.13}$$

2. $\Gamma_3\cup\Gamma_4$ donde el flujo de calor es nulo, y por tanto se impone una condición de contorno Neumann homogénea:

$$k(T)\frac{\partial T}{\partial n}=0 \tag{6.14}$$

Los parámetros que se han tomado en la actualización del multiplicador p_h^m son

$$\lambda=\frac{1}{2\omega}\qquad\qquad \omega=2 \tag{6.15}$$

y en la actualización de q_h^m son

$$\gamma=\frac{1}{2\xi}\qquad\qquad \xi=1 \tag{6.16}$$

En un paso de tiempo fijo $t_m = m\,\Delta t$, para comprobar la convergencia del algoritmo se ha utilizado un test de parada sobre los multiplicadores, de manera que se tiene la convergencia del algoritmo en la iteración s cuando se verifican simultáneamente las condiciones siguientes

$$\frac{\| p^m_{h\,[s-1]} - p^m_{h\,[s]} \|_2}{\| p^m_{h\,[s-1]} \|_2} \leq \epsilon \tag{6.17}$$

$$\frac{\| q^m_{h\,[s-1]} - q^m_{h\,[s]} \|_2}{\| q^m_{h\,[s-1]} \|_2} \leq \epsilon \tag{6.18}$$

donde $\epsilon = 10^{-14}$.
Jerome y Rose en [8], dan la siguiente estimación de error

$$\left[\sum_{m=0}^{N} \| u - u^m_h \|^2_{L^2(\Omega)\,\Delta t} \right]^{1/2} \leq C\, h^{2/3} \tag{6.19}$$

siempre que $\Delta t \leq c\, h^{4/3}$, donde c y C representan dos constantes positivas.
Se ha tomado un mallado inicial de Ω_o, y se han construido mallados para ejecuciones consecutivas, dividiendo el parámetro de discretización h del mallado inmediatamente anterior entre 2. Del mismo modo, se han considerado mallados del intervalo de tiempo, teniendo en cuenta la relación: $\Delta t \leq c\, h^{4/3}$.
La siguiente tabla, muestra los resultados obtenidos para diferentes pruebas

h	Δt	Error
0.353553	0.25	2.3615×10^{-3}
0.176776	0.1	1.6980×10^{-3}
0.088388	0.03846	8.4475×10^{-4}
0.044194	0.01562	4.5133×10^{-4}
0.022097	0.00617	2.6486×10^{-4}

El error es del orden de h^α, donde α calculado entre dos pruebas consecutivas va tomando los valores

$$\alpha = 0.47, \;\; \alpha = 1.0071, \;\; \alpha = 0.9043, \;\; \alpha = 0.7694$$

Bibliografía

[1] Bermúdez, A. and Moreno, C.: *Duality methods for solving variational inequalities.* Comput. Math. Appl. n^0 7 (1981) 43-58.

[2] Bermúdez, A. et Saguez, C.: *Une équation non linéaire intervenant en solidification.* Rapports de Recherche n^0 34 (1980) 1-16.

[3] Ciavaldini, J. R.:*Analyse numérique d'un probléme de Stefan á deux phases par une methode d'élements finis.* SIAM J. Numer. Anal. n^{0}2 (1975) 464-487.

[4] Dautray, J. et Lions, J. L.: Analyse mathématique et calcul numérique pour les sciences et les techniques. Masson, Paris, (1984).

[5] Durany, J.: Contribución al estudio matemático del problema de Stefan en medios no homogéneos. Tesis, Universidad de Santiago de Compostela, (1983).

[6] Elliot, C. M.: *On a variational inequatity of electrochemical machining moving boundary problem and its aproximation by the finite element method.* J. Inst. Maths. Applics. vol 25 n^{o}4 (1980) 121-131.

[7] Grange, O. et Mignot, F.: *Sur la résolution d'une équation ou d'une inéquation parabolique d'évolution.* Journal of Functional Analysis n^0 11 (1972) 77-92.

[8] Jerome, J. W. and Rose, M.: *Error estimates for the multidimensional two-phase Stefan problem.* Math. Comp. n^{o}39 (1982) 377-401.

[9] Meirmanov, A. M.: The Stefan Problem. Walter de Gruyter. New York (1992).

[10] Nochetto, R. H.: *Error estimates for two phase Stefan problems in several space variables. I: Linear boundary conditions..* Calcolo n^{o}22 (1985) 457-499.

[11] Nochetto, R. H. and Verdi, C.: *Aproximation of degenerate parabolic problems using numerical integration.* SIAM J. Numer. Anal. n^{o}4 (1988) 784-814.

[12] Saguez, C.: Contrôle optimal de systèmes gouvernés à frontière libre. Thèse d'Etat. Univ. Tech. Compiègne. France (1980).