Mecánica Computacional Vol. XVI
compilado por G. Etse y B. Luccioni
Tucumán, Septiembre de 1996

EXISTENCIA DE UN TIEMPO DE ESPERA PARA UN PROBLEMA DE STEFAN A DOS FASES, APROXIMACION NUMERICA

SANZIEL, María Cristina

PROMAR (CONICET-UNR),
Instituto de Matemática "B.Levi",
Facultad de Ciencias Exactas e Ingeniería,
Avda Pellegrini 250,
(2000) Rosario, Argentina.

RESUMEN

Se considera una barra representada por el intervalo $0 < x < x_\circ$, a temperatura inicial $\theta_\circ = \theta_\circ(x) \geq 0$, sometida a un flujo de calor $q=q(t) > 0$ en la cara izquierda $x = 0$ y a una temperatura $b(t) > 0$ en la cara derecha $x = x_\circ$ ($x_\circ$ podría ser también $+\infty$, es decir un material semi-infinito). Se considera el correspondiente problema de conducción del calor y se supone que la temperatura de cambio de fase es de 0°. Se realiza el análisis numérico del problema utilizando dos métodos distintos de diferencias finitas, uno implícito y el otro explícito.

Se prueba la necesidad y/o suficiencia de ciertas condiciones sobre los datos, a fin de obtener la existencia de un tiempo de espera en el cual se inicie un cambio de fase en el problema discreto.

ABSTRACT

We consider a slab, represented by the interval $0 < x < x_\circ$, at the initial temperature $\theta_\circ = \theta_\circ(x) \geq 0$ having a heat flux $q=q(t) > 0$ on the left face $x = 0$ and a temperature condition $b(t) > 0$ on the right face $x = x_\circ$ ($x_\circ$ could be also $+\infty$, i.e., a semi-infinite material). We consider the corresponding heat conduction problem and we assume that the phase-change temperature is 0°C. We make the numerical analysis of the problem through two distinctic finite difference methods, one implicit and the other explicit.

We prove that certain conditions on the data are necessary and/or sufficient in order to obtain the existence of a waiting-time at which a phase-change begins in the discrete problem.

I. INTRODUCCION

Se considera el siguiente problema de conducción del calor ($0 < x_\circ \leq +\infty$):

$$\text{i)}\quad \rho\, c\, \theta_t - k\, \theta_{xx} = 0, \quad 0 < x < x_o, \quad t > 0, \qquad (1)$$
$$\text{ii)}\quad \theta(x,0) = \theta_o(x) > 0, \quad 0 \leq x \leq x_o, \qquad (2)$$
$$\text{iii)}\quad k\, \theta_x(0,t) = q(t) > 0, \qquad t > 0, \qquad (3)$$
$$\text{iv)}\quad \theta(x_o,t) = b(t), \qquad t > 0, \qquad (4)$$

donde ρ es la densidad de masa, k es la conductividad térmica y c es el calor específico. $\theta_o = \theta_o(x)$ es la temperatura inicial y la función $b(t)$ representa la temperatura en el borde $x = x_o$ $(0 < x_o \leq +\infty)$. Para el caso $x_o = +\infty$ se reemplaza la condición (4) por $\theta(+\infty,t) = \theta_o(+\infty) > 0$, para $t > 0$.
Sin pérdida de generalidad se supone que la temperatura de cambio de fase es 0°C.

Según como sean los datos θ_o, q y b puede ocurrir que:
(a) el problema de conducción del calor esté definido para todo tiempo $t > 0$.
(b) exista un tiempo de espera $t^* < +\infty$ de manera que, para tiempos $t \geq t^*$ aparezca otra fase (en nuestro caso la sólida). En esta circunstancia existe una frontera libre $x = s(t)$ que separa las fases, con $s(t^*) = 0$.

Para el caso de temperatura $b(t) = b > 0$ constante en $x = x_0$ y flujo $q(t) = q > 0$, también constante, la solución estacionaria viene dada por:

$$\theta_\infty(x) = \frac{q}{k}(x - x_o) + b \qquad (5)$$

y una condición necesaria para obtener un problema estacionario de Stefan a dos fases es que

$$q > \frac{kb}{x_o} \qquad (6)$$

donde k es la conductividad térmica de la fase líquida [1] (para el caso n-dimensional ver también [2,3]).

Recordando que la solución del problema (1) – (4) con datos $b > 0$ y $q > 0$ converge a $\theta_\infty = \theta_\infty(x)$ cuando t tiende a $+\infty$ [4], en [5] se planteó el problema de hallar la relación entre el flujo q en $x = 0$ y un tiempo t_1 tal que para $t \geq t_1$ aparezca otra fase, y se obtuvieron los siguientes resultados:

Teorema 1: [5] Se supone que la temperatura inicial verifica la condición $b \geq \theta_o \geq 0$ en $[0,x_o]$ y $\theta_o(x_o) = b$. Si $t_1 > 0$ y el flujo constante $q > 0$ verifica la desigualdad

$$q > \frac{bk}{x_o\left(1 - \exp\left(-\frac{\alpha\pi^2 t_1}{4 x_0^2}\right)\right)} \quad , \alpha = \frac{k}{\rho c} \qquad (7)$$

entonces, otra fase (la sólida) aparece para $t \geq t_1$. Más aún, $\theta(0,t) < 0$ para todo $t \geq t_1$ y la frontera libre $x = s(t)$ comienza en un punto $(0,t')$ con $0 \leq t' < t_1$.

Corolario 2: [5] Si se considera el plano t,q y se define el siguiente conjunto:

$$Q = \left\{ (t,q) \,/\, q > f(t),\ t > 0 \right\}, \quad f(t) = \frac{bk}{x_o[1 - \exp(-\frac{\alpha\pi^2 t}{4x_0^2})]}, \qquad (8)$$

entonces se tiene un problema de Stefan a dos fases para todo $(t,q) \in Q$.

En la sección 2 del presente trabajo se aplica un método de diferencias finitas implícito a fin de obtener un esquema numérico para aproximar la solución del problema (1) – (4) y se obtienen algunas condiciones sobre los datos que garantizan la positividad de la solución discreta.
En la sección 3, aplicando un método de diferencias finitas explícito, se expresa la temperatura discreta en el borde x=0 como un polinomio en la variable $\lambda=\alpha\frac{\Delta t}{\Delta x^2}$ (siendo Δt el paso en la variable temporal y Δx el paso en la variable espacial) y se obtiene una desigualdad, en la que intervienen el flujo q y la temperatura inicial θ_o, a fin de asegurar la presencia de otra fase (la sólida) a partir de un cierto instante de tiempo.

II. APLICACION DE UN METODO DE DIFERENCIAS FINITAS IMPLICITO

Para discretizar el problema (1) – (4) se establece un mallado de paso espacial $\Delta x = \frac{x_o}{N}$ (N natural) para la variable x y de paso Δt para la variable temporal t.
Se notará con U_i^j a una aproximación de la solución θ en el punto $(x_i, t_j) = (i\Delta x, j\Delta t)$ para $i= 0, 1, \ldots, N$ y $j=1,2,3,\ldots$
Se aproxima la ecuación (1) por:

$$\frac{U_i^j-U_i^{j-1}}{\Delta t} - \alpha\,\frac{U_{i-1}^j-2\,U_i^j+U_{i+1}^j}{\Delta x^2} = 0 \qquad (9)$$

$i= 1, \ldots, N-1$, $j=1,2,3,\ldots$

Las condiciones (2), (3) y (4) se traducen respectivamente en:

$$U_i^o = \theta_o(x_i) \qquad i=0,1,\ldots,N \qquad (10)$$

$$U_o^j = -\frac{\Delta x}{k}\,q(t_j) \qquad j=1,2,3,\ldots \qquad (11)$$

$$U_N^j = b(t_j) \qquad j=1,2,3,\ldots \qquad (12)$$

Definiendo $\lambda = \alpha\frac{\Delta t}{\Delta x^2}$ y $\mathbf{U^j} = (U_1^j, U_2^j, \ldots, U_{N-1}^j)^t$ el problema discreto (9) – (12) se escribe en forma matricial :

$$\mathbf{A\,U^j} = \mathbf{U^{j-1}} + \mathbf{c^j} \qquad (13)$$

con

$$\mathbf{A} = \begin{pmatrix} 1+\lambda & -\lambda & 0 & : & : & 0 \\ -\lambda & 1+2\lambda & -\lambda & 0 & : & 0 \\ 0 & -\lambda & : & & : & 0 \\ 0 & : & : & : & : & 0 \\ : & & & & : & -\lambda \\ 0 & 0 & 0 & : & -\lambda & 1+2\lambda \end{pmatrix} \qquad (14)$$

y $$\mathbf{c}^j = \begin{pmatrix} -\lambda \frac{\Delta x}{k} q(t_j) \\ 0 \\ \vdots \\ 0 \\ \lambda b(t_j) \end{pmatrix} \qquad (15)$$

Este método de diferencia regresiva resulta ser incondicionalmente estable y converge a la solución del problema continuo con un orden de convergencia $O(\Delta t + \Delta x^2)$ [6].

Se verá a continuación qué relación deben guardar los datos para que, si la temperatura discreta U_i^j es positiva ($i = 0,1, \ldots ,N$), la temperatura discreta U_i^{j+1} en el siguiente paso de tiempo, resulte también positiva.

Veamos algunas definiciones que serán útiles en lo que sigue:

Definición i) Una matriz $\mathbf{M} = (m_{ij})$ se dice **positiva** si todos sus elementos m_{ij} son no negativos (es decir $m_{ij} \geq 0 \; \forall \, i, j$).

En particular, un vector $\mathbf{v} = (v_i)$ se dice **positivo** si $v_i \geq 0 \; \forall \, i$.

ii) Una matriz cuadrada real **M** se dice **monótona** si es inversible y su inversa es positiva.

Además [7]:

$$\mathbf{M} \text{ es monótona } \Leftrightarrow \{\mathbf{v} \in \mathbf{R}^n : \mathbf{Mv} \geq 0\} \subset \{\mathbf{v} \in \mathbf{R}^n : \mathbf{v} \geq 0\} \qquad (16)$$

Teorema 2: la matriz **A** definida en (14) es monótona.

D) Sea **v** que verifica $\mathbf{Av} \geq 0$ $\qquad \mathbf{v} = (v_1, v_2, \ldots, v_{N-1})^t$

Sea p el subíndice para el cual $v_p \leq v_i \; \forall \, i = 1, 2, \ldots, N-1$

Si $p = 1$

$0 \leq (\mathbf{Av})_1 = (1+\lambda)\, v_1 - \lambda v_2 = v_1 + \lambda(v_1 - v_2) \leq v_1 \Rightarrow v_1 \geq 0 \Rightarrow \mathbf{v} \geq 0$

Si $2 \leq p \leq N-2$

$0 \leq (\mathbf{Av})_p = -\lambda v_{p-1} + (1+2\lambda)\, v_p - \lambda v_{p+1} \leq v_p \Rightarrow v_p \geq 0 \Rightarrow \mathbf{v} \geq 0$

Si $p = N-1$

$0 \leq (\mathbf{Av})_{N-1} = -\lambda v_{N-2} + (1+2\lambda)\, v_{N-1} \leq v_{N-1} \Rightarrow v_{N-1} \geq 0 \Rightarrow \mathbf{v} \geq 0$

Aplicando (16) resulta **A** monótona.□

Teorema 3: Sean los datos q , θ_0 y b constantes ($\theta_0 = b$, $\mathbf{c}^j = \mathbf{c} \; \forall j$) y $\mathbf{U}^j = (U_1^j, U_2^j, \ldots, U_{N-1}^j)^t$ que verifica el esquema (13) para $j = 1, 2, \ldots$. Entonces, si en un instante de tiempo $t_j = j\Delta t$ es $\mathbf{U}^j$ positivo y

$$q < \frac{U_1^j k}{\Delta x} \qquad (17)$$

resulta $\mathbf{U}^{j+1}$ positivo.

D) Como consecuencia del Teorema 2, la matriz $\mathbf{A}^{-1}$, inversa de **A**, es positiva.

De (13) resulta $\mathbf{U}^{j+1} = \mathbf{A}^{-1}(\mathbf{U}^j + \mathbf{c})$ y por lo tanto, para que U^{j+1} sea positivo es suficiente que $U^j + \mathbf{c}$ sea positivo, es decir, teniendo en cuenta (15), la tesis.□

III. CONDICIONES PARA LA OBTENCION DE UN TIEMPO DE ESPERA

Si se aproxima (1) por la ecuación en diferencias

$$\frac{U_i^j - U_i^{j-1}}{\Delta t} - \alpha \frac{U_{i-1}^{j-1} - 2U_i^{j-1} + U_{i+1}^{j-1}}{\Delta x^2} = 0 \qquad (18)$$

$$i = 1, \ldots, N-1, \; j = 1, 2, 3, \ldots$$

y se consideran las condiciones (10), (11) y (12) se obtiene un esquema en diferencias finitas explícito para encontrar la temperatura discreta U_i^j que aproxima a $\theta(x_i, t_j)$:

$$U_i^{j+1} = U_i^j + \lambda(U_{i+1}^j - 2U_i^j + U_{i-1}^j) \qquad (19)$$

Si bien este método no es tan eficiente como el empleado en la sección anterior, ya que es condicionalmente estable y converge a la solución del problema (1) – (4) con una razón de convergencia $O(k+h^2)$ sólo si [6]:

$$\lambda \leq \tfrac{1}{2} \qquad (20)$$

se lo utiliza aquí pues permite obtener una expresión de la temperatura discreta en el borde $x = 0$ para todo paso de tiempo $j\Delta t$, en función de los datos inicial y de borde. De este modo es posible establecer condiciones suficientes para la obtención de un tiempo de espera en el problema discreto.

Teorema 4: Si los datos b, q y θ_o son constantes, $b = \theta_o$ y se verifica (20), los valores U_i^m de la temperatura discreta obtenidos aplicando el esquema (19), con las condiciones (9), (10) y (11), verifican:

i) $U_i^m \leq U_{i+1}^m \qquad i = 1, \ldots, N-1, \; m=0,1,2,3, \ldots \qquad (21)$

ii) $U_i^m \leq U_i^{m+1} \qquad i = 1, \ldots, N \qquad, m=0,1,2,3, \ldots \qquad (22)$

D) i) La demostración se hace por inducción para m:
Considerando (10), para m=0 (21) se verifica.
Suponiendo que (21) es válido para m=k, a partir de (19) se obtiene

$$U_{i+1}^{k+1} - U_i^{k+1} = (1-2\lambda)(U_{i+1}^k - U_i^k) + \lambda(U_{i+2}^k - U_{i+1}^k) + (U_i^k - U_{i-1}^k) \geq 0$$

ii) La demostración se hace también por inducción para m y es similar a i) .□

Como consecuencia de este teorema, para determinar el instante de tiempo, a partir del cual aparece la fase sólida, en el problema discreto, basta calcular para qué valor de j resulta $U_o^j < 0$.

Teorema 5: Con las hipótesis del Teorema 4 resulta

$$U_i^j = \theta_o - q\tfrac{\Delta x}{k} P_i^j(\lambda) \quad i=1, 2, \ldots, N-1 \qquad j=1, 2, \ldots \qquad (23)$$

$$\text{donde } P_i^j(x) = \sum_{m=i}^{j-1} a_m(i,j)\, x^m \qquad j = 1, 2, \ldots$$

con $a_m(i,j)=0$ si $i \geq j$.

D) La demostración se hace por un doble proceso de inducción, es decir, se verifica la validez de (23) en cada paso de tiempo j, para todo i=1, 2, . . ., N-1 y luego para todo j=1, 2, . . ., aplicando reiteradamente (19), (9) y (10).□

Teorema 6: Con las hipótesis del Teorema 4 resulta

$$U_{\circ}^{j} = \theta_{\circ} - q\frac{\Delta x}{k}P_{\circ}^{j}(\lambda) \qquad j=1, 2, \ldots \tag{24}$$

donde $P_{\circ}^{j}(x) = \sum_{m=0}^{j-1} a_m(j)\, x^m$

con $a_{\circ}(j) = 1 \qquad a_1(j) = j-1$

$$a_m(j) = \frac{(-1)^{m+1}2^{m-1}(2m-3)!!\,(j-1)!}{(m!)^2(j-(m+1))!} \qquad m = 2, \ldots, j\text{-}1$$

D) Se prueba por inducción para j, aplicando los resultados del teorema 5.

Corolario 7: Si $q > \frac{\theta_{\circ}k}{\Delta x P_{\circ}^{j}(\lambda)}$ existe un tiempo de espera $t_j = j\Delta t$ a partir del cual el problema (19), (10)-(12) es a dos fases.

AGRADECIMIENTO

Este trabajo ha sido parcialmente financiado por el Proyecto Nro.221 "Aplicaciones de Problemas de Frontera Libre" de CONICET, Rosario, Argentina.

REFERENCIAS

[1] D.A. TARZIA, "Sobre el caso estacionario del problema de Stefan a dos fases", Math. Notae, 28(1980), 73-89.

[2] D.A. TARZIA, "An inequality for the constant heat flux to obtain a steady-state two-phase Stefan problem", Engineering Analysis, 5(1988), 177 – 181.

[3] D.A. TARZIA, "The two-phase Stefan problem and some related conduction problems", Reuniões em Matemática Aplicada e Computacão Científica, Vol. 5, SBMAC-Soc. Brasileira Mat. Apl. Comput., Gramado (1987).

[4] A. FRIEDMAN, "Partial differential equations of parabolic type", Prentice-Hall, Englewood Cliffs (1964).

[5] D.A. TARZIA-C.V.TURNER "A note on the existence of a waiting time por a two-phase Stefan problem", Quart. Appl. Math.,50 (1992), 1-10.

[6] E. ISAACSON-H.B. KELLER "Analysis of numerical methods", J.Wiley & Sons, New York (1966).

[7] P.G. CIARLET "Introduction à l'analyse numérique matricielle et à l'optimisation", Masson, Paris, (1990).