

PROBLEMAS DE CHOQUE TÉRMICO EN EL MÉTODO DE LOS ELEMENTOS FINITOS

Alejandro Cosimo y Alberto Cardona

Centro Internacional de Métodos Computacionales en Ingeniería (CIMEC-INTEC), Universidad Nacional del Litoral-CONICET, Güemes 3450, S3000GLN Santa Fe, Argentina

Palabras Clave: Método de los elementos finitos, Choque térmico, Estabilización, Funciones burbujas

Resumen. Cuando se resuelven problemas gobernados por ecuaciones parabólicas por medio del método de los elementos finitos pueden obtenerse oscilaciones espurias en la solución. Dicho fenómeno se conoce en la literatura como choque térmico y su efecto comienza a ser importante cuando el número adimensional de Fourier que caracteriza al problema se hace pequeño, es decir, este fenómeno aparece siempre que $\alpha\Delta t < ch^2$ y se presenten altos gradientes, siendo Δt el paso de tiempo, α la difusividad del material, h la longitud característica de la malla utilizada y c una constante independiente de h . En este trabajo se estudian maneras de corregir este problema. Para ello en una primera instancia se identifica y se describe el problema. En una segunda etapa se da a conocer el estado del arte y se proponen nuevas alternativas. Seguidamente se presentan aplicaciones de las ideas desarrolladas y por último se exponen las conclusiones.

1. INTRODUCCIÓN

En ingeniería se requiere resolver problemas de transferencia de calor de variadas características, yendo de problemas lineales y escalares en donde la temperatura es la única incógnita hasta problemas no lineales como los de solidificación. Bajo ciertas consideraciones, estos problemas se gobiernan por ecuaciones parabólicas cuya solución, desde un punto de vista cualitativo, tiene propiedades deseables de ser verificadas por las soluciones numéricas (Farago y Horvath, 2009). Dos de estas propiedades son: la preservación no negativa, o sea que la temperatura del cuerpo no puede ser negativa si la temperatura en los bordes y en el estado inicial no son negativas; y el principio del máximo, que dice que la temperatura del cuerpo está acotada por la intensidad de la fuente y la temperatura inicial y de los bordes. Es importante notar que la última propiedad implica la primera, y por ello buscaremos métodos que cumplan con dicha propiedad.

Cuando el problema se discretiza por medio del método de los elementos finitos utilizando un esquema Bubnov-Galerkin, se obtiene una formulación que no garantiza que se cumpla el principio del máximo discreto (Cordes y Putti, 2001). En estos casos, se pueden observar oscilaciones espurias en aquellas zonas en donde la capa límite térmica es muy pequeña y no puede ser capturada por la discretización espacio-temporal utilizada. Diferentes aproximaciones han sido propuestas para la corrección de este problema. Ciarlet (1970) dio condiciones suficientes para garantizar que el esquema numérico cumple con el principio del máximo. Sintéticamente, si la matriz del sistema de ecuaciones algebraicas resultante tiene términos diagonales no negativos y términos no diagonales no positivos (M-matriz) entonces el esquema cumple con el principio del máximo. Pueden encontrarse extensiones de este resultado a problemas no lineales, e.g. Farago et al. (2009).

Cuando se utilizan esquemas implícitos de integración en problemas 1D y 2D, la matriz de masas contribuye a que la matriz del sistema no sea una M-matriz. De aquí que una solución directa al problema sea diagonalizar la matriz de masas. Una de las técnicas más utilizada para diagonalizar es la suma por fila, pero debe tenerse en cuenta que se pueden llegar a obtener pivotes negativos en la matriz de masas diagonalizada de esta manera (Hughes, 2000). Además en problemas 3D la matriz de rigidez contribuye a que no se obtenga una M-matriz debido a consideraciones geométricas (Kosik et al., 2000). En algunas aplicaciones se observa también que con la diagonalización se obtiene una difusión adicional considerable. Otro medio de corregir este problema es el refinamiento adaptativo, aunque para ciertas aplicaciones esta opción no es aceptable.

Una alternativa consiste en utilizar el método de Galerkin discontinuo (Zienkiewicz et al., 2003), como se puede encontrar en Pichelin y Coupez (1998). Este método se caracteriza por expresar la solución con polinomios constantes por trozos, teniendo la desventaja de incrementar la cantidad de grados de libertad. Fachinotti y Bellet (2006) proponen un particionado (*splitting*) de la matriz de rigidez, aunque en problemas altamente no lineales como los de solidificación la difusión introducida puede llegar a ser importante.

Otra posibilidad consiste en tomar ideas prestadas de los esquemas obtenidos de los métodos variacionales multiescala (Hughes et al., 1998). En este sentido siguiendo a Codina (2002) y a Codina et al. (2007), se podría interpretar la subescala dependiente del tiempo y resolverla aproximadamente considerando dicha dependencia.

Un camino más simple es buscar un esquema del tipo Petrov-Galerkin en donde se modifique la función de peso con una perturbación, y así se obtenga una formulación estabilizada. Una manera de encarar este problema es efectuar en un primer paso la discretización temporal,

obteniéndose un factor de orden cero que es interpretado como un término reactivo. Luego, se puede estabilizar el problema con un esquema Petrov-Galerkin centrado como lo proponen [Idelsohn et al. \(1996\)](#). El trabajo adicional que habría que efectuar es extender dicha idea a elementos triangulares y tetraédricos, ya que en dicha publicación el estudio se centra en elementos cuadrangulares.

Otra perspectiva se puede tomar de la comunidad de Computational Fluid Dynamics (CFD) y consiste en trabajar con el esquema de FEM-FCT (Finite Element Method - Flux-Corrected Transport). Este esquema se basa en combinar una solución de bajo orden sin oscilaciones espurias con otra solución de alto orden que puede contener oscilaciones. Lo interesante radica en que la solución de bajo orden se puede obtener con un esquema estable utilizando la matriz de masas diagonalizada. La solución de alto orden se puede lograr utilizando la matriz masas consistente. Esta combinación se hace de manera tal de evitar la presencia de oscilaciones espurias en la solución numérica. El inconveniente subyacente a esta idea es que la solución de bajo orden podría tener inconvenientes en mallas tridimensionales, en donde la condición del ángulo diédrico no se cumple. En este caso la solución de bajo orden también estaría contaminada de oscilaciones.

[Ilinca y Héту \(2002\)](#) utilizan como esquema de estabilización el método introducido por [Franca y Dutra Do Carmo \(1989\)](#) denominado Gradient Galerkin Least Squares (GGLS), que a diferencia del Galerkin Least Squares (GLS), no sólo contribuye con una estabilización L_2 sino también con una estabilización H_1 , obteniéndose una mayor regularidad en la solución numérica. Además, se puede demostrar que el método GLS no es globalmente conservativo, mientras que GGLS sí lo es. A esto hay que agregar que la perturbación que introduce GLS a la función de peso tiene el efecto de estar resolviendo el problema con un paso de tiempo más grande. Por otra parte, [Hachem et al. \(2010\)](#) proponen utilizar una burbuja cúbica cuasiestática y luego condensarla. De esta manera llegan a una estabilización equivalente a GLS, y efectúan una interpolación temporal de la solución para corregir el efecto de estar resolviendo el problema con un paso de tiempo más grande al especificado.

Con las dos últimas técnicas se obtienen buenos resultados para problemas lineales. Además, desde el punto de vista computacional, el método no es costoso. La simplicidad de estas formulaciones las hacen buenas candidatas para utilizarlas en problemas no lineales como los problemas de cambio de fase (que nos interesan de manera especial en este trabajo).

En este trabajo se estudia y ensaya el esquema de estabilización logrado mediante enriquecimiento utilizando la burbuja propuesta por [Hachem et al. \(2010\)](#). Se discuten luego posibles extensiones al caso no lineal. En la sección 2 se presenta la descripción matemática del problema, en la sección 3 se estudia la discretización del caso lineal por medio del Método de los Elementos Finitos (MEF) y su estabilización. En la sección 4 se discute la estabilización del esquema numérico presentado en [Fachinotti et al. \(1999\)](#) destinado a la resolución de problemas no lineales de cambio de fase. Por último se presentan las conclusiones.

2. DESCRIPCIÓN MATEMÁTICA DEL PROBLEMA

Se exponen a continuación las ecuaciones que describen un problema de cambio de fase isotérmico. El caso lineal es un caso especial de éste. Los problemas de cambio de fase isotérmico son gobernados por el primer principio de la termodinámica. Asumiendo que la contribución de la energía mecánica a la energía total es despreciable, y considerando a la entalpía específica \mathcal{H} como un potencial termodinámico, puede mostrarse que el campo de temperatura T satisface la

siguiente ecuación de balance

$$\rho \dot{\mathcal{H}} = Q + \nabla \cdot (k \nabla T) \quad \forall (\mathbf{x}, t) \in \Omega_i \times (t_0, \infty) \quad (1)$$

donde ρ es la densidad, k la conductividad térmica, T la temperatura, Q una fuente externa de calor por unidad de volumen, y Ω_i para $i \in [s, l]$ son los dominios sólido y líquido. El campo de temperatura debe verificar la siguiente condición inicial

$$T = T_0 \quad \forall \mathbf{x} \in \Omega_i, t = t_0 \quad (2)$$

donde $T_0(\mathbf{x})$ es el campo de temperatura inicial. Adicionalmente debe satisfacerse el siguiente conjunto de condiciones de borde

$$T = T_d \quad \forall (\mathbf{x}, t) \in \Gamma_d \times (t_0, \infty) \quad (3)$$

$$-(k \nabla T) \cdot \mathbf{n} = q_w \quad \forall (\mathbf{x}, t) \in \Gamma_q \times (t_0, \infty) \quad (4)$$

$$-(k \nabla T) \cdot \mathbf{n} = h_f(T - T_f) \quad \forall (\mathbf{x}, t) \in \Gamma_c \times (t_0, \infty) \quad (5)$$

donde T_d es la temperatura impuesta en el borde Γ_d , q_w es el flujo de calor externo en el borde Γ_q , h_f es el coeficiente de convección de calor y T_f es la temperatura del fluido externo en la porción del borde Γ_c . Finalmente, en la interfaz Γ , que está determinada por el frente de solidificación, deben verificarse la restricción en la temperatura y la condición de Stefan

$$T = T_m \quad \forall (\mathbf{x}, t) \in \Gamma \times (t_0, \infty) \quad (6)$$

$$[-(k \nabla T) \cdot \mathbf{n}_\Gamma]_\Gamma = \rho \mathcal{L} u_\Gamma \quad \forall (\mathbf{x}, t) \in \Gamma \times (t_0, \infty). \quad (7)$$

Aquí, \mathcal{L} es el calor latente, T_m es la temperatura de fusión, \mathbf{n}_Γ es la normal al frente de solidificación exterior al dominio sólido, u_Γ es la velocidad de la interfaz en la dirección de la normal \mathbf{n}_Γ y el operador $[\cdot]_\Gamma$ mide el salto de la cantidad \cdot en el borde del cambio de fase. La ecuación (6) describe la restricción que impone que la temperatura en la interfaz debe ser igual a la temperatura de fusión. La ecuación (7) es la conocida condición de interfaz o condición de Stefan.

2.1. Formulación variacional en temperatura

Sean $\mathcal{S} = \{T/T \in \mathcal{H}^1(\Omega), T|_{\Gamma_d} = T_d\}$ el espacio de soluciones de prueba y $\mathcal{V} = \{v/v \in \mathcal{H}^1(\Omega), v|_{\Gamma_d} = 0\}$ el espacio de funciones de peso o funciones de prueba, con \mathcal{H}^1 el espacio de Sobolev de primer orden. Integrando separadamente en cada subdominio (sólido y líquido), la forma débil de la ecuación (1) se obtiene

$$\sum_{i \in [s, l]} \int_{\Omega_i} w [\rho \dot{\mathcal{H}} - \nabla \cdot (k \nabla T) - Q] d\Omega = 0 \quad (8)$$

con $w \in \mathcal{V}$ y $T \in \mathcal{S}$. Luego, aplicando el teorema de la divergencia y reemplazando las condiciones de borde dadas por las ecuaciones (3 - 5), se obtiene

$$\begin{aligned} \sum_i \int_{\Omega_i} w [\rho \dot{\mathcal{H}} - Q] d\Omega + \sum_i \int_{\Omega_i} \nabla w \cdot (k \nabla T) d\Omega - \\ \sum_i \int_{\Gamma_i} w k \nabla T \cdot \mathbf{n} d\Gamma + \int_{\Gamma_c} w h_f (T - T_f) d\Gamma + \int_{\Gamma_q} w q_w d\Gamma = 0. \quad (9) \end{aligned}$$

Haciendo uso del teorema de Reynolds en el primer término de la ecuación (9), se obtiene la siguiente expresión para cada subdominio

$$\int_{\Omega_i} w \rho \dot{\mathcal{H}} \, d\Omega = \frac{\partial}{\partial t} \int_{\Omega_i} w \rho \mathcal{H} \, d\Omega - \int_{\Gamma_i} w \rho \mathcal{H} \mathbf{u}_i \cdot \mathbf{n}_i \, d\Gamma \quad (10)$$

donde \mathbf{u}_i es la velocidad de la frontera Γ_i y \mathbf{n}_i es el vector normal a dicha frontera. Reemplazando la ecuación (10) en la ecuación (9), y usando la condición de Stefan (7) en la interfaz Γ , se obtiene

$$\sum_i \left[\frac{\partial}{\partial t} \int_{\Omega_i} w \rho \mathcal{H} \, d\Omega - \int_{\Omega_i} w Q \, d\Omega + \int_{\Omega_i} \nabla w \cdot (k \nabla T) \, d\Omega \right] + \int_{\Gamma_c} w h_f (T - T_f) \, d\Gamma + \int_{\Gamma_q} w q_w \, d\Gamma = 0. \quad (11)$$

Integrando sobre todo el dominio Ω , se llega a

$$\int_{\Omega} w \left[\rho \dot{\mathcal{H}} - Q \right] \, d\Omega + \int_{\Omega} \nabla w \cdot (k \nabla T) \, d\Omega + \int_{\Gamma_c} w h_f (T - T_f) \, d\Gamma + \int_{\Gamma_q} w q_w \, d\Gamma = 0. \quad (12)$$

Expresamos la entalpía en términos de la temperatura como

$$\mathcal{H} = \int_{T_{\text{ref}}}^T c(\tau) \, d\tau + \mathcal{L} f_l(T) \quad (13)$$

donde T_{ref} es la temperatura de referencia, $c(\tau) \equiv c$ es la capacidad calorífica y $f_l(T)$ es la fracción líquida, que para el caso de cambio de fase isotérmico, está dada por la función de Heaviside, i.e. $f_l = H_{\text{eav}}(T - T_m)$.

Luego, reemplazando la ecuación (13) en la ecuación (12), se obtiene la siguiente formulación variacional en temperatura

Hallar $T \in \mathcal{S}$ tal que $\forall w \in \mathcal{V}$

$$\int_{\Omega} w \left[\rho c \frac{\partial T}{\partial t} + \rho \mathcal{L} \frac{\partial f_l}{\partial t} - Q \right] \, d\Omega + \int_{\Omega} \nabla w \cdot (k \nabla T) \, d\Omega + \int_{\Gamma_c} w h_f (T - T_f) \, d\Gamma + \int_{\Gamma_q} w q_w \, d\Gamma = 0, \quad \text{si } t > 0; \\ \int_{\Omega} w T \, d\Omega = \int_{\Omega} w T_0 \, d\Omega, \quad \text{si } t = 0. \quad (14)$$

Puede observarse que al eliminar el término de la fracción líquida $\rho \mathcal{L} \frac{\partial f_l}{\partial t}$, el cual se debe al cambio de fase, se obtiene la formulación variacional clásica para un problema de conducción de calor lineal.

2.2. FORMULACIÓN VARIACIONAL DISCRETA

Se presenta a continuación la formulación variacional discreta desde un punto de vista general, es decir sin especificar los subespacios involucrados en dicha discretización. Sean $\mathcal{S}^h \subset \mathcal{S}$ y $\mathcal{V}^h \subset \mathcal{V}$ subespacios N -dimensionales de los espacios de funciones de prueba y de funciones

de peso. Discretizando en el tiempo con un esquema implícito de Euler hacia atrás, se tiene

Dado T_{n-1}^h , hallar $T_n^h = v^h + T_d^h$, donde $v^h \in \mathcal{V}^h$ y $T_n^h|_{\Gamma_d} = T_d^h$, tal que

$$\int_{\Omega} w^h \left[\rho c_n \frac{T_n^h - T_{n-1}^h}{\Delta t} + \rho \mathcal{L} \frac{f_{l(n)} - f_{l(n-1)}}{\Delta t} \right] d\Omega - \int_{\Omega} \left[\nabla w^h \cdot (k_n \nabla T_n^h) + w^h Q_n \right] d\Omega + \int_{\Gamma_q} w^h q_{w_n} d\Gamma + \int_{\Gamma_c} w^h h_{f_n} (T_n^h - T_{f_n}^h) d\Gamma = 0 \quad \forall w^h \in \mathcal{V}^h, \quad n = 1, 2, 3, \dots \quad (15)$$

$$\int_{\Omega} w^h T_0^h d\Omega = \int_{\Omega} w^h T_0 d\Omega \quad \forall w^h \in \mathcal{V}^h \quad n = 0. \quad (16)$$

Por simplicidad de presentación, se asume que $T_d^h = 0$, de forma que $T_n^h = v^h$. Luego, la ecuación (15) puede ser escrita como

$$\begin{aligned} \frac{1}{\Delta t} \int_{\Omega} \rho c_n w^h T_n^h d\Omega - \frac{1}{\Delta t} \int_{\Omega} \rho c_n w^h T_{n-1}^h d\Omega + \frac{1}{\Delta t} \int_{\Omega} \rho \mathcal{L} w^h f_{l(n)} d\Omega - \\ \frac{1}{\Delta t} \int_{\Omega} \rho \mathcal{L} w^h f_{l(n-1)} d\Omega + \int_{\Omega} k_n \nabla T_n^h \cdot \nabla w^h d\Omega - \int_{\Omega} Q_n w^h d\Omega + \\ \int_{\Gamma_q} w^h q_w d\Gamma + \int_{\Gamma_c} w^h h_{f_n} T_n^h d\Gamma + \int_{\Gamma_c} w^h h_{f_n} T_{f(n)}^h d\Gamma = 0. \end{aligned} \quad (17)$$

3. MÉTODO DE ELEMENTOS FINITOS: CASO LINEAL

Se estudia el caso lineal y su discretización por MEF, utilizando como estrategia de estabilización el esquema descrito en [Hachem et al. \(2010\)](#). En el desarrollo que sigue se hará uso de la notación usual:

$$(v, w) = \int_{\Omega} vw d\Omega, \quad (\mathbf{v}, \mathbf{w}) = \int_{\Omega} \mathbf{v} \cdot \mathbf{w} d\Omega. \quad (18)$$

El subespacio de funciones de forma \mathcal{V}^h utilizado en la ecuación (15) va estar compuesto por un espacio de polinomios lineales por trozos \mathcal{V}_1^h y por un espacio de funciones burbuja \mathcal{V}_b^h . Específicamente se usarán funciones burbuja cúbicas cuasi-estáticas que se caracterizan por tomar el valor cero en el borde del elemento sobre el cual se encuentran definidas, y la unidad en el baricentro del mismo. Esto puede expresarse como $\mathcal{V}^h = \mathcal{V}_1^h \oplus \mathcal{V}_b^h$. Luego, denotando por T^{h*} a la función de prueba perteneciente al espacio \mathcal{V}^h , se tiene elementalmente

$$T^{h*} = N_i T_i + T_b \psi \quad (19)$$

en donde $N_i \in \mathcal{V}_1^h$ son funciones base estándar de grado uno, T_i los parámetros nodales asociados a esta base, $\psi \in \mathcal{V}_b^h$ la función burbuja asociada al elemento y T_b el grado de libertad introducido por la burbuja.

Primero se resuelve la subescala utilizando las burbujas como funciones de peso. De aquí se obtiene una expresión para el parámetro asociado a la burbuja. Paso seguido se resuelve la macroescala condensando la burbuja. De esta manera se llega a la siguiente formulación variacional discreta

$$\left(w^h \left(1 - \tau_K \frac{\rho c}{\Delta t} \right), \frac{\rho c}{\Delta t} T_n^h \right) + \left(\nabla w^h, k \nabla T_n^h \right) = \left(w^h \left(1 - \tau_K \frac{\rho c}{\Delta t} \right), f + \frac{\rho c}{\Delta t} T_{n-1}^h \right), \quad (20)$$

siendo $T_n^h = N_i T_i \in \mathcal{V}_1^h$, $w^h \in \mathcal{V}_1^h$ y

$$\tau_k = \frac{Ch_K^2}{\frac{\rho c}{\Delta t} h_K^2 + k\bar{C}}, \quad (21)$$

en donde h_K es una longitud característica del elemento, f es el término que nuclea a las contribuciones provenientes de los bordes y de la fuente, y las constantes $C = 1$ y $\bar{C} = 6$ (Baicocchi et al., 1993).

En ausencia del término f , la ecuación (20) se puede escribir como

$$\left(\frac{\rho c}{\Delta t^*} T_n^h, w^h \right) + \left(k \nabla T_n^h, \nabla w^h \right) = \left(\frac{\rho c}{\Delta t^*} T_{n-1}^h, w^h \right), \quad (22)$$

con

$$\Delta t^* = \frac{\Delta t}{\left(1 - \tau_K \frac{\rho c}{\Delta t} \right)}. \quad (23)$$

Esto puede interpretarse como la solución del problema con un paso de tiempo Δt^* mayor al paso de tiempo especificado Δt . De hecho, la formulación obtenida es equivalente a GLS, que también tiene este inconveniente.

Hachem et al. (2010) proponen una modificación por medio de una interpolación temporal. Denotando por T^* a la solución obtenida con el paso de tiempo Δt^* y definiendo el parámetro $\xi_K > 0$ por

$$\xi_K = \frac{\Delta t^*}{\Delta t} = \left(1 - \tau_K \frac{\rho c}{\Delta t} \right)^{-1}, \quad (24)$$

se obtiene la siguiente formulación discreta estabilizada

$$\int_{\Omega} \rho c w^h \frac{T_n^h - T_{n-1}^h}{\Delta t} d\Omega + \sum_K \int_{\Omega_K} \xi_K k \nabla w^h \cdot \nabla T_n^h d\Omega = \sum_K \int_{\Omega_K} (\xi_K - 1) k \nabla w^h \cdot \nabla T_{n-1}^h d\Omega. \quad (25)$$

Para controlar la difusión numérica introducida por el esquema de estabilización, se introduce un limitador. Haciendo uso del número adimensional de Fourier se determina un tiempo crítico t_{crit} (Fachinotti y Bellet, 2006), asumiendo por simplicidad que las inestabilidades son originadas por la condición inicial. Si el tiempo de cálculo actual t_n es menor que el tiempo crítico, pueden surgir inestabilidades numéricas y se debe estabilizar. Por el contrario, una vez que la evolución temporal de la simulación supera el tiempo crítico, ya no es necesario estabilizar. Por esto, el parámetro ξ_K en la ecuación (25) queda finalmente definido por

$$\xi_K = \begin{cases} \left(1 - \tau_K \frac{\rho c}{\Delta t} \right)^{-1} & t_n < t_{\text{crit}} \\ 1 & t_n \geq t_{\text{crit}} \end{cases} \quad (26)$$

donde t_n es el tiempo de cálculo actual y t_{crit} viene dado por

$$t_{\text{crit}} = \frac{\rho c h_K^2}{k}. \quad (27)$$

3.1. EJEMPLO DE APLICACIÓN I: PROBLEMA UNIDIMENSIONAL

En este ejemplo se resuelve numéricamente un problema básicamente unidimensional en una región bidimensional utilizando condiciones de borde adiabáticas. Se trata un sólido semi infinito que inicialmente se halla a 1°C y repentinamente uno de sus extremos es enfriado a 0°C . La conductividad es $k = 10^{-2} \frac{\text{W}}{^\circ\text{C}\cdot\text{m}}$, la capacidad calorífica es $c = 1 \frac{\text{J}}{^\circ\text{C}\cdot\text{kg}}$ y la densidad es $\rho = 1 \frac{\text{kg}}{\text{m}^3}$. El dominio tiene un tamaño de 1×1 metros y para la discretización espacial se utilizó una malla estructurada de triángulos con 10 divisiones en cada uno de los ejes coordenados. Para la discretización temporal se utilizó un paso de tiempo $\Delta t = 10^{-3}\text{s}$.

En la figura (1) se pueden observar los resultados obtenidos en distintos instantes de tiempo. Como puede apreciarse, el esquema de estabilización utilizado cumple con el principio del máximo discreto y no se producen oscilaciones en la solución.

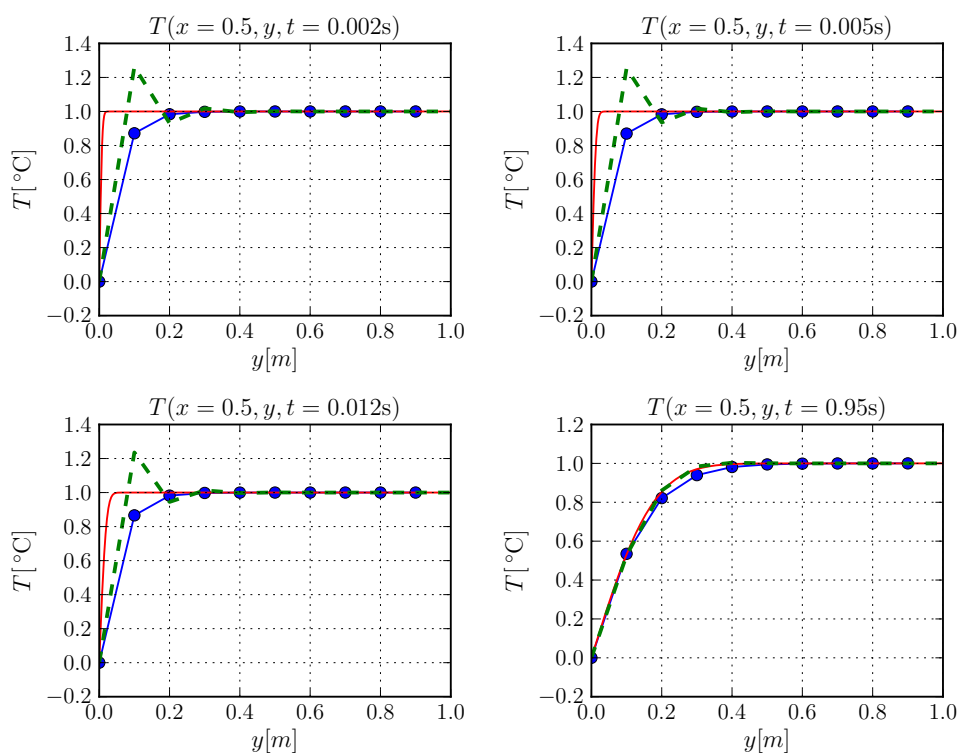


Figura 1: Solución del ejemplo I en diferentes pasos de tiempo con 10 divisiones. En trazo continuo la solución exacta, en trazo discontinuo la solución obtenida sin estabilizar y en trazo de línea y círculos la solución obtenida con el esquema de estabilización.

3.2. EJEMPLO DE APLICACIÓN II: PROBLEMA BIDIMENSIONAL

En este ejemplo se resuelve numéricamente un problema bidimensional, en donde el dominio está dado por una región cuadrada de 1×1 metros y se utilizó para la discretización espacial una malla estructurada de triángulos con 10 divisiones en cada uno de los ejes coordenados. Para la discretización temporal se utilizó un paso de tiempo $\Delta t = 0,1\text{s}$. Inicialmente el cuerpo se halla a $274,15\text{K}$ y repentinamente es enfriado en todos sus bordes a $273,15\text{K}$. La conductividad es $k = 2,7415 \times 10^{-4} \frac{\text{W}}{\text{K}\cdot\text{m}}$, la capacidad calorífica es $c = 274,15 \frac{\text{J}}{\text{K}\cdot\text{kg}}$ y la densidad es $\rho = 1 \frac{\text{kg}}{\text{m}^3}$.

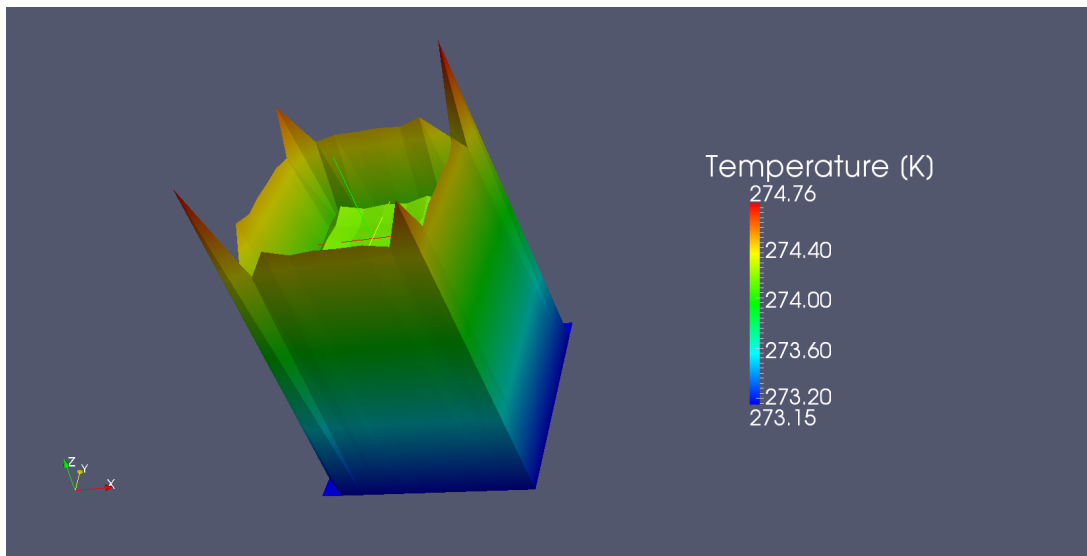


Figura 2: Resultado obtenido sin estabilizar a los 0,1s.

En las figuras (2) y (3) se pueden observar los resultados obtenidos sin estabilizar y estabilizando, respectivamente. En dichas figuras se representa al campo temperatura como una superficie, en donde la altura $T(\boldsymbol{x})$ representa la temperatura en el punto $\boldsymbol{x} = (x_1, x_2)$ del dominio. Nuevamente, se puede concluir que estabilizando el principio del máximo discreto se cumple y se obtiene una solución libre de oscilaciones espurias.

4. MÉTODO DE ELEMENTOS FINITOS: CASO NO LINEAL

En lo que sigue analizamos problemas de cambio de fase, los cuales se caracterizan por presentar no linealidades muy fuertes. Tomando como base la formulación variacional (17), y utilizando elementos lineales por trozos e integración discontinua, se obtiene la discretización del problema haciendo uso del MEF. El desarrollo completo de esta discretización puede ser encontrado en Fachinotti et al. (1999).

Es importante mencionar que para formulaciones de cambio de fase basadas en temperatura, la contribución elemental del calor latente debe ser calculada de manera precisa para lograr convergencia del esquema numérico a la solución exacta. Es por esto que Fachinotti et al. (1999) utilizan integración discontinua y efectúan un cálculo exacto de las integrales utilizando para su evaluación las coordenadas de área del triángulo en 2D o las coordenadas de volumen del tetraedro en 3D. Para este procedimiento es fundamental que la interfaz en el interior del elemento no sea curva, ya que en caso contrario no es sencillo determinar las regiones de integración y se podrían introducir errores al evaluar la contribución del calor latente.

A continuación analizamos la aplicación de la técnica de estabilización por medio de enriquecimiento con una burbuja cuasiestática cúbica al problema de conducción de calor con cambio de fase, en presencia de condiciones de choque térmico. Destacamos que esta formulación no complica la algoritmia asociada a la integración discontinua. Además, veremos tampoco se incrementan la no linealidad del problema ni el costo computacional.

Como se mencionara en la sección anterior, el subespacio de funciones de forma \mathcal{V}^h utilizado en la ecuación (15) estará dado por $\mathcal{V}^h = \mathcal{V}_1^h \oplus \mathcal{V}_b^h$, con lo cual a nivel elemental se tiene $T^h = N_i T_i + T_{b_K} \psi_K = T_1 + T_{b_K} \psi_K$ en donde K denota el K -ésimo elemento y $T^h \in \mathcal{V}^h$.

Primero resolvemos la subescala pesando con las funciones burbuja. Para poder condensar de manera sencilla el término T_{b_K} se toman valores promedio de las propiedades termofísicas a

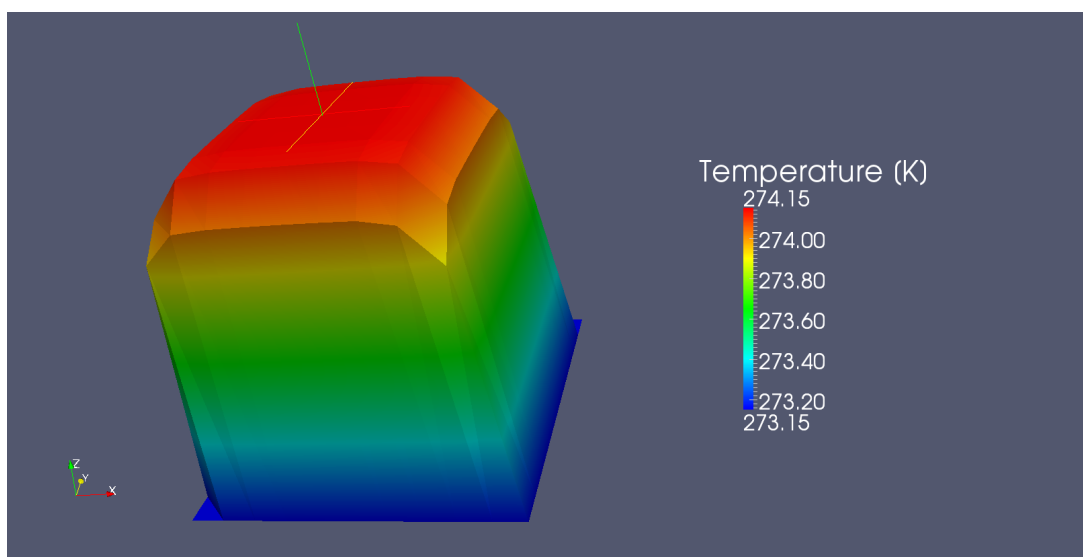


Figura 3: Resultado obtenido a los 0,1s con el esquema estabilizado.

nivel elemental. Se debe tener en cuenta que en el caso no lineal dichas propiedades varían con la temperatura, y por ello se considera dicha dependencia en la macro-escala asumiendo que las propiedades termofísicas varían linealmente dentro del elemento. Así, en la subescala a nivel elemental se tiene

$$\left(\frac{\rho c^*}{\Delta t} T_1^{(i)}, \psi\right) + \left(\frac{\rho c^*}{\Delta t} T_{bK}^{(i)} \psi, \psi\right) + \left(k^* \nabla T_1^{(i)}, \nabla \psi\right) + \left(k^* \nabla \psi T_{bK}^{(i)}, \nabla \psi\right) + \left(\frac{\rho \mathcal{L}}{\Delta t} f_{l(n)}, \psi\right) = (f, \psi) + \left(\frac{\rho c^*}{\Delta t} T_{n-1}^h, \psi\right) + \left(\frac{\rho \mathcal{L}}{\Delta t} f_{l(n-1)}, \psi\right), \quad (28)$$

en donde p^* es el promedio de la propiedad p evaluada en los puntos de Gauss del elemento, f es el término fuente, e i denota el valor de la cantidad asociada en la i -ésima iteración del esquema de Newton-Raphson utilizado para resolver el problema no lineal. A pesar de que en la ecuación anterior aparece el término $T_{bK}^{(i)}$, el mismo no aparecerá de manera explícita en el esquema de Newton-Raphson ya que será condensando.

Nótese que la fracción líquida en el instante t_n depende de la temperatura en dicho tiempo, o sea depende de $f_{l(n)}(T) = f_{l(n)}(T_1^{(i)} + T_{bK}^{(i)})$. Sin embargo, como la burbuja toma valor nulo en los bordes del elemento, la intersección de la interfaz con dichos bordes no cambiará con respecto a si utilizamos sólo a $T_1^{(i)}$ para determinar la posición de la interfaz. En efecto, la burbuja sólo tiene el efecto de curvar la interfaz dentro del elemento. Si se desprecia dicha curvatura y se considera recta la interfaz dentro del elemento, es correcto aproximar la fracción líquida como función sólo de $T_1^{(i)}$, en la forma

$$f_{l(n)}(T) = f_{l(n)}(T_1^{(i)} + T_{bK}^{(i)}) \simeq f_{l(n)}(T_1^{(i)}). \quad (29)$$

Con este análisis vemos que el término de la ecuación (28) asociado a $f_{l(n)}$ no depende de $T_{bK}^{(i)}$, y luego

$$\frac{\rho c^*}{\Delta t} T_{bK}^{(i)} (\psi, \psi) + k^* T_{bK}^{(i)} (\nabla \psi, \nabla \psi) = (f, \psi) + \left(\frac{\rho c^*}{\Delta t} T_{n-1}^h, \psi\right) + \left(\frac{\rho \mathcal{L}}{\Delta t} f_{l(n-1)}, \psi\right) - \left(\frac{\rho c^*}{\Delta t} T_1^{(i)}, \psi\right) - \left(\frac{\rho \mathcal{L}}{\Delta t} f_{l(n)}, \psi\right). \quad (30)$$

De esta forma se tiene

$$T_{b_K}^{(i)} = \frac{1}{\frac{\rho c^*}{\Delta t} \|\psi\|^2 + k^* \|\nabla \psi\|^2} \left(f + \frac{\rho c^*}{\Delta t} [T_{n-1}^h - T_1^{(i)}] + \frac{\rho \mathcal{L}}{\Delta t} [f_{l(n-1)} - f_{l(n)}], \psi \right). \quad (31)$$

A continuación, se resuelve la macroescala tomando como funciones de peso a $w_1 \in \mathcal{V}_1$ considerando que las propiedades termofísicas dependen linealmente de la temperatura dentro de los elementos. De aquí se tiene para el elemento K

$$\left(\frac{\rho c^{(i)}}{\Delta t} T_1^{(i)}, w_1 \right) + \left(\frac{\rho c^{(i)}}{\Delta t} T_{b_K}^{(i)} \psi, w_1 \right) + \left(k^{(i)} \nabla T_1^{(i)}, \nabla w_1 \right) + \left(\frac{\rho \mathcal{L}}{\Delta t} f_{l(n)}, w_1 \right) = \left(f, w_1 \right) + \left(\frac{\rho c^{(i)}}{\Delta t} T_{n-1}^h, w_1 \right) + \left(\frac{\rho \mathcal{L}}{\Delta t} f_{l(n-1)}, w_1 \right). \quad (32)$$

Como se quiere condensar la burbuja ψ , se debe estudiar en detalle el segundo término de la ecuación anterior. Luego, se tiene

$$\begin{aligned} \left(\frac{\rho c^{(i)}}{\Delta t} T_{b_K}^{(i)} \psi, w_1 \right) &= T_{b_K}^{(i)} \frac{\rho}{\Delta t} \left(c^{(i)} \psi, w_1 \right) = \\ &= \frac{1}{\frac{\rho c^*}{\Delta t} \|\psi\|^2 + k^* \|\nabla \psi\|^2} \left(f + \frac{\rho c^*}{\Delta t} [T_{n-1}^h - T_1^{(i)}] + \frac{\rho \mathcal{L}}{\Delta t} [f_{l(n-1)} - f_{l(n)}], \psi \right) \frac{\rho}{\Delta t} \left(c^{(i)} \psi, w_1 \right). \end{aligned} \quad (33)$$

Haciendo uso de la teoría desarrollada en [Baiocchi et al. \(1993\)](#) y de los resultados expuestos en [Franca y Farhat \(1995\)](#), la ecuación (33) resulta en

$$\left(\frac{\rho c^{(i)}}{\Delta t} T_{b_K}^{(i)} \psi, w_1 \right) = \tau_K \left(f + \frac{\rho c^*}{\Delta t} [T_{n-1}^h - T_1^{(i)}] + \frac{\rho \mathcal{L}}{\Delta t} [f_{l(n-1)} - f_{l(n)}], \frac{\rho c^{(i)}}{\Delta t} w_1 \right), \quad (34)$$

en donde

$$\tau_K = \frac{C h_K^2}{\frac{\rho c^*}{\Delta t} h_K^2 + k^* \bar{C}}, \quad (35)$$

siendo las constantes C y \bar{C} independientes de h , tomando los valores $C = 1$ y $\bar{C} = 6$.

Reemplazando el resultado anterior en la ecuación (32) se llega a

$$\begin{aligned} \tau_K \left(f + \frac{\rho c^*}{\Delta t} [T_{n-1}^h - T_1^{(i)}] + \frac{\rho \mathcal{L}}{\Delta t} [f_{l(n-1)} - f_{l(n)}], \frac{\rho c^{(i)}}{\Delta t} w_1 \right) + \left(\frac{\rho c^{(i)}}{\Delta t} T_1^{(i)}, w_1 \right) + \\ \left(k^{(i)} \nabla T_1^{(i)}, \nabla w_1 \right) + \left(\frac{\rho \mathcal{L}}{\Delta t} f_{l(n)}, w_1 \right) = \left(f, w_1 \right) + \left(\frac{\rho c^{(i)}}{\Delta t} T_{n-1}^h, w_1 \right) + \left(\frac{\rho \mathcal{L}}{\Delta t} f_{l(n-1)}, w_1 \right). \end{aligned} \quad (36)$$

Reescribiendo la ecuación anterior se llega a la siguiente formulación discreta estabilizada:

$$\begin{aligned} \left(\frac{\rho c^{(i)}}{\Delta t} T_1^{(i)}, w_1 \left[1 - \frac{\rho c^*}{\Delta t} \tau_K \right] \right) + \left(k^{(i)} \nabla T_1^{(i)}, \nabla w_1 \right) + \left(\frac{\rho \mathcal{L}}{\Delta t} f_{l(n)}, w_1 \left[1 - \frac{\rho c^{(i)}}{\Delta t} \tau_K \right] \right) = \\ \left(f, w_1 \left[1 - \frac{\rho c^{(i)}}{\Delta t} \tau_K \right] \right) + \left(\frac{\rho c^{(i)}}{\Delta t} T_{n-1}^h, w_1 \left[1 - \frac{\rho c^*}{\Delta t} \tau_K \right] \right) + \left(\frac{\rho \mathcal{L}}{\Delta t} f_{l(n-1)}, w_1 \left[1 - \frac{\rho c^{(i)}}{\Delta t} \tau_K \right] \right). \end{aligned} \quad (37)$$

Para evitar que la estabilización introduzca difusión excesiva en el esquema numérico, se utiliza nuevamente como limitador el tiempo crítico t_{crit} , esto es

$$\tau_K = \begin{cases} \left(\frac{\rho c^*}{\Delta t} + 6 \frac{k^*}{h_K^2} \right)^{-1} & t_n < t_{crit} \\ 0 & t_n \geq t_{crit} \end{cases}. \quad (38)$$

4.1. INTERPOLACIÓN TEMPORAL

Introduciendo la simplificación $c^* \simeq c^{(i)}$ en la ecuación (37), se puede hacer la interpretación de que la formulación discreta estabilizada dada por dicha ecuación corresponde a la solución obtenida con un paso de tiempo Δt^* mayor al paso de tiempo Δt especificado, siempre que se tome una fuente ficticia $f^* = \xi_K f$ con ξ_K dado por la ecuación (41) y que se asuma $f(t + \Delta t) \simeq f(t + \Delta t^*)$. Se obtiene así la solución T^* y no la buscada $T_n^{(i)}$ (se puede realizar un análisis similar para la fracción líquida $f_{l(n)}$):

$$\left(\frac{\rho c^{(i)}}{\Delta t^*} T^*, w_1\right) + \left(k^{(i)} \nabla T^*, \nabla w_1\right) + \left(\frac{\rho \mathcal{L}}{\Delta t^*} f_{l(n)}^*, w_1\right) = \left(\xi_K f, \frac{w_1}{\xi_K}\right) + \left(\frac{\rho c^{(i)}}{\Delta t^*} T_{n-1}^h, w_1\right) + \left(\frac{\rho \mathcal{L}}{\Delta t^*} f_{l(n-1)}, w_1\right), \quad (39)$$

en donde

$$\Delta t^* = \frac{\Delta t}{\left(1 - \tau_K \frac{\rho c^*}{\Delta t}\right)} \quad (40)$$

y

$$\xi_K = \frac{\Delta t^*}{\Delta t} = \left(1 - \tau_K \frac{\rho c^*}{\Delta t}\right)^{-1}. \quad (41)$$

Para obtener la solución al instante $t + \Delta t$ se introduce la siguiente interpolación para la temperatura y para la fracción líquida

$$T^* = \xi_K T_n^{(i)} + (1 - \xi_K) T_{n-1}^h \quad (42)$$

$$f_{l(n)}^* = \xi_K f_{l(n)} + (1 - \xi_K) f_{l(n-1)}. \quad (43)$$

Luego, reemplazando las ecuaciones (42) y (43), en la ecuación (39) se llega a la siguiente formulación discreta estabilizada

$$\left(\frac{\rho c^{(i)}}{\Delta t} T_n^{(i)}, w_1\right) + \left(\xi_K k^{(i)} \nabla T_n^{(i)}, \nabla w_1\right) + \left((1 - \xi_K) k^{(i)} \nabla T_{n-1}^h, \nabla w_1\right) + \left(\frac{\rho \mathcal{L}}{\Delta t} f_{l(n)}, w_1\right) = \left(f, w_1\right) + \left(\frac{\rho c^{(i)}}{\Delta t} T_{n-1}^h, w_1\right) + \left(\frac{\rho \mathcal{L}}{\Delta t} f_{l(n-1)}, w_1\right). \quad (44)$$

Nuevamente se utiliza el tiempo crítico t_{crit} como limitador, esto es

$$\xi_K = \begin{cases} \left(1 - \tau_K \frac{\rho c^*}{\Delta t}\right)^{-1} & t_n < t_{\text{crit}} \\ 1 & t_n \geq t_{\text{crit}} \end{cases}. \quad (45)$$

Los resultados obtenidos con esta formulación serán presentados en la exposición oral.

5. CONCLUSIONES

El problema de choque térmico que afecta a discretizaciones MEF bajo ciertas condiciones de borde, puede llegar a afectar considerablemente la precisión de resultados. Estos inconvenientes aparecen cuando la solución exhibe altos gradientes que no pueden ser capturados por la discretización espacio-temporal utilizada.

En este trabajo, se analizó la estabilización por enriquecimiento utilizando una burbuja cuasiestática cúbica, siguiendo una formulación inicialmente presentada por [Hachem et al. \(2010\)](#).

Por medio de ejemplos numéricos se verificó que para problemas lineales se obtienen soluciones precisas y libres de oscilaciones espurias.

Se presentó el problema no lineal de cambio de fase y se discutió la estabilización de una formulación MEF que pueda tratar de manera óptima el problema del choque térmico. Se desarrolló así una extensión de la formulación de Hachem et al. a problemas no lineales con cambio de fase. Esta técnica tiene particular interés para la simulación computacional de problemas de soldadura (Computational Welding Mechanics).

REFERENCIAS

- Baiocchi C., Brezzi F., y Franca L.P. Virtual bubbles and Galerkin-least-squares type methods (Ga.L.S.). *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, 105(1):125 – 141, 1993.
- Ciarlet P.G. Discrete maximum principle for finite-difference operators. *Aequationes Mathematicae*, 4:338–352, 1970.
- Codina R. Stabilized finite element approximation of transient incompressible flows using orthogonal subscales. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, 191(39–40):4295 – 4321, 2002. ISSN 0045-7825.
- Codina R., Principe J., Guasch O., y Badia S. Time dependent subscales in the stabilized finite element approximation of incompressible flow problems. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, 196(21–24):2413 – 2430, 2007. ISSN 0045-7825.
- Cordes C. y Putti M. Accuracy of Galerkin finite elements for groundwater flow simulations in two and three-dimensional triangulations. *International Journal for Numerical Methods in Engineering*, 52(4):371, 2001.
- Fachinotti V. y Bellet M. Linear tetrahedral finite elements for thermal shock problems. *International Journal of Numerical Methods for Heat and Fluid Flow*, 16(5):590–601, 2006.
- Fachinotti V.D., Cardona A., y Huespe A.E. A fast convergent and accurate temperature model for phase-change heat conduction. *International Journal for Numerical Methods in Engineering*, 44(12):1863–1884, 1999. ISSN 1097-0207.
- Farago I. y Horvath R. Continuous and discrete parabolic operators and their qualitative properties. *IMA Journal of Numerical Analysis*, 29(3):606, 2009.
- Farago I., Karatson J., y Korotov S. Discrete maximum principles for the fem solution of some nonlinear parabolic problems. *Electronic Transactions on Numerical Analysis*, páginas 149–167, 2009.
- Franca L. y Dutra Do Carmo E. The Galerkin gradient least-squares method. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, 74(1):41 – 54, 1989. ISSN 0045-7825.
- Franca L.P. y Farhat C. Bubble functions prompt unusual stabilized finite element methods. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, 123(1–4):299 – 308, 1995. ISSN 0045-7825.
- Hachem E., Dignonnet H., Kosseifi N., Massoni E., y Coupez T. Enriched finite element spaces for transient conduction heat transfer. *Applied Mathematics and Computation*, 217(8):3929 – 3943, 2010. ISSN 0096-3003.
- Hughes T. The finite element method: linear static and dynamic finite element analysis. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, 65(2), 2000.
- Hughes T.J., Feijóo G.R., Mazzei L., y Quincy J.B. The variational multiscale method—a paradigm for computational mechanics. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, 166(1–2):3 – 24, 1998. ISSN 0045-7825.
- Idelsohn S., Nigro N., Storti M., y Buscaglia G. A Petrov-Galerkin formulation for advection-

- reaction-diffusion problems. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, 136(1–2):27 – 46, 1996. ISSN 0045-7825.
- Ilinca F. y Héту J. Galerkin gradient least-squares formulations for transient conduction heat transfer. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, 191(27–28):3073 – 3097, 2002. ISSN 0045-7825.
- Kosik R., Fleischmann P., Haindl B., Pietra P., y Selberherr S. On the interplay between meshing and discretization in three-dimensional diffusion simulation. *Computer-Aided Design of Integrated Circuits and Systems, IEEE Transactions on*, 19(11):1233 –1240, 2000.
- Pichelin E. y Coupez T. A Taylor discontinuous Galerkin method for the thermal solution in 3D mold filling. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, 178(1–2):153 – 169, 1998. ISSN 0045-7825.
- Zienkiewicz O.C., Taylor R.L., Sherwin S.J., y Peir J. On discontinuous Galerkin methods. *International Journal for Numerical Methods in Engineering*, 58(8):1119, 2003. doi:10.1002/nme.884.