

CNEA-NT 5/85

PMTM/I-10

01.85.08
04.85.00

REPUBLICA ARGENTINA
COMISION NACIONAL DE ENERGIA ATOMICA
Dependiente de la Presidencia de la Nación
GERENCIA DE DESARROLLO

RESOLUCION NUMERICA DE UN PROBLEMA DE STEFAN:

SOLIDIFICACION UNIDIRECCIONAL DE

METALES PUROS

Edgardo MOYANO
Daniel BALZARETTI
Eduardo VICENTE

Buenos Aires

1985

RESUMEN

Se presenta un modelo computacional para cálculo de la distribución de temperaturas y de la cinética de la interfase sólido-líquido, durante la solidificación unidireccional de metales puros en moldes refrigerados. Se considera un metal puro, inicialmente líquido y a su temperatura de fusión, en contacto térmico imperfecto con un sumidero perfecto de calor. Se resuelve la ecuación diferencial de conducción del calor en la fase sólida, mediante el método de diferencias finitas implícito, con paso espacial fijo y paso temporal variable. Se estudia la influencia de los números adimensionales de Biot y Stefan en el rango : $10^{-2} < Bi < 10^{+2}$, $10^{-1} Ste < 10$.

Se obtuvo satisfactoria concordancia con las soluciones analíticas asintóticas de Stefan ($Bi \gg 1$) y de Flemings ($Bi \ll 1$) y con la solución analítica aproximada de Pires, Prates y Biloni cuando $Ste < 1$ y para todo Bi .

ABSTRACT

A computer model, for the study of thermal profiles and kinetics of the solid-liquid interphase during the unidirectional solidification of pure metals, is presented. It is assumed that the liquid metal is initially at its melting temperature and in contact with a perfect sink of heat. A finite thermal resistance at the metal-sink interphase exists and it remains constant during the solidification process.

The heat conduction equation is solved in the solid phase through the finite difference method with an implicit scheme. It is used a variable grid (constant spacial step and variable time step). The influence of both Stefan and Biot dimensionless numbers ($10^{-1} < Ste < 10$ and $10^{-2} < Bi < 10^{+2}$), is studied.

Numerical results show satisfactory agreement with both Stefan ($Bi \gg 1$) and Flemings ($Bi \ll 1$) asymptotics analytical solutions, and with Pires, Prates and Biloni analytical approach for $Ste < 1$ whatever Bi .

RESOLUCION NUMERICA DE UN PROBLEMA DE STEFAN: SOLIDIFICACION UNIDIMENSIONAL DE METALES PUROS

Edgardo A. Moyano*

Daniel Balzaretti*

Eduardo Vicente*

1. INTRODUCCION

Se acostumbra llamar "problemas de Stefan" a aquellos problemas de difusión con una frontera libre, recordando a quien efectuara una de las primeras publicaciones sobre el tema, dedicada al estudio del desplazamiento de la interfase sólido-líquido en el proceso de fusión de una barra de hielo (Stefan, 1891).

Las transformaciones de fase controladas por difusión (de calor o de masa), constituyen una clase muy amplia de problemas de Stefan. En el primer caso el fenómeno está regido por la ecuación de conducción del calor no estacionaria y en el segundo caso por la segunda ley de Fick (Carslaw y Jaeger, 1959), (Crank, 1975).

Desde el punto de vista matemático, resolver un problema de Stefan implica hallar la solución de una ecuación diferencial de tipo parabólica en un dominio variable dependiente de la incógnita. Si bien la ecuación puede ser lineal, el dominio de la misma depende de la solución y, por lo tanto, el problema es no lineal.

Un problema de Stefan de gran importancia en Metalurgia es la evolución calórica durante la solidificación de un lingote o una pieza obtenida por fundición y colada. La estructura obtenida en el lingote o la pieza depende, además de la composición química del material, de la evolución calórica o historia térmica del material. Su resultado imprimirá el tipo de propiedades mecánicas, físicas, químicas y, por ende, la calidad del producto terminado (Biloni, 1977). Una descripción de la complejidad de los fenómenos de transporte de calor y masa intervinientes durante la solidificación de grandes lingotes de acero fue efectuada por Vicente y Solari, 1981.

Existen diversos procesos tecnológicos en los cuales el metal líquido solidifica en contacto con un molde metálico (normalmente cobre) refrigerado con agua: colada continua, refusión por arco bajo vacío, refusión por electroescoria, y otros procesos (Flemings, 1974). Por otra parte, una tecnología emergente, la solidificación rápida de metales, emplea dispositivos en los cuales el metal toma contacto con un sumidero casi perfecto de calor para producir una violenta extracción calórica que origina una nueva familia de estructuras cristalinas metaestables e incluso metales amorfos o también llamados "vidrios metálicos" (Mehrbian, 1982).

* CNEA - Departamento de Materiales.

El conocimiento de la evolución temporal del perfil de temperaturas $T'(x', t')$ y de la posición de la interfase sólido-líquido $s'(t')$ durante la solidificación unidireccional de metales puros en contacto con moldes refrigerados tiene aplicación en los procesos tecnológicos mencionados. En el caso en que el metal es vertido (colado) a su temperatura de fusión T'_f (sin sobre-calentamiento), en un sumidero perfecto de calor ("chill" o molde refrigerado), a temperatura T'_0 con contacto térmico imperfecto en la interfase metal-molde (debido a la existencia de óxidos, presencia de pintura, formación de un "gap" de aire, etc.), no existe solución analítica exacta de validez general conocida. La dificultad matemática surge al considerar la interfase metal-molde, caracterizada por un coeficiente de transferencia calórica de tipo newtoniano h .

En el caso particular en que $h = \infty$, es decir, cuando existe contacto térmico perfecto entre el molde y el metal que solidifica, existe una solución analítica exacta dada por (Stefan, 1891) la cual predice que el espesor solidificado depende de la raíz cuadrada del tiempo ($s' \propto \sqrt{t'}$) (ver Apéndice A).

Suele decirse que el flujo calórico está "controlado" por la resistencia térmica del metal sólido. Esta solución es aplicable para grandes espesores sólidos ($\frac{hs'}{k} \gg 1$) o para tiempos largos ($\frac{h^2 at'}{k^2} \gg 1$).

Por otra parte, cuando la conductividad térmica del metal sólido es infinita $k = \infty$, existe una solución analítica exacta, la cual predice una dependencia lineal entre el espesor sólido y el tiempo ($s' \propto t'$) (Flemings, 1974) (ver Apéndice B).

En este caso el flujo calórico está "controlado" por la resistencia térmica de la interfase metal-molde. Esta solución es aplicable para pequeños espesores solidificados ($\frac{hs'}{k} \ll 1$) o para tiempos cortos ($\frac{h^2 at'}{k^2} \ll 1$).

Para situaciones intermedias entre los casos límites mencionados diversas aproximaciones analíticas (basadas en el método del balance integral calórico) han sido propuestas. Estas soluciones han sido revisadas por Jones, 1969 y por Prates y Biloni, 1971; diferenciándose entre sí por las funciones que se adoptan para describir el perfil térmico en el metal solidificado: lineal (London y Seban, 1943) y cuadrática (Adams, 1958; Megerlin, 1966; Hells, 1969).

Tratamientos más rigurosos, en los cuales el perfil térmico se calcula en lugar de postularlo han sido efectuados por Ferreyra y Bertorello, 1982; aunque la solución obtenida sólo es válida para los primeros estadios de la solidificación del metal.

Un modelo analítico aproximado, que describe exclusivamente la cinética de la solidificación pero no el perfil de temperaturas, fue propuesto por Pires y colab., 1974. Este modelo consiste esencialmente en la combinación de las soluciones de Stefan y de Flemings.

También ha sido publicado un modelo empírico por Prates y colab., 1972 el cual predice esencialmente que la interfase sólido-líquido avanza con la raíz cuadrada del tiempo.

Un procedimiento alternativo para resolver el problema descripto consiste en el empleo de métodos numéricos. Una revisión de los métodos de tratamiento

numérico por diferencias finitas para la resolución de problemas de Stefan unidimensionales fue efectuada por Caracino, Marshall y Moyano, 1981.

En el presente trabajo se ha empleado el método de diferencias finitas con un esquema implícito y malla variable (paso espacial fijo y paso temporal variable). Antecedentes de este tipo de metodología son los trabajos de Douglas y Gailie, 1955; Goodman y Khader, 1974; Gupta y Kumar, 1980, y Caracino, Marshall y Moyano, 1981.

2. FORMULACION DEL PROBLEMA

Hipótesis:

- a) El flujo de calor es unidireccional.
- b) El metal se halla inicialmente en estado líquido a su temperatura de fusión T'_F .
- c) El metal solidifica con la interfase sólido-líquido macroscópicamente plana.
- d) Las propiedades físicas del metal se suponen constantes.
- e) El molde se considera un sumidero perfecto de calor a temperatura T'_0 .
- f) Existe contacto térmico imperfecto en la interfase metal-molde caracterizado por un coeficiente de transferencia calórica de tipo newtoniano h , el cual permanece constante durante el proceso de solidificación.

El problema planteado implica resolver la ecuación de conducción del calor no-estacionaria unidimensional en un dominio variable (metal sólido) con una condición de borde de tipo Cauchy en la interfase metal-molde y dos condiciones de borde en la interfase sólido-líquido: una de tipo Dirichlet y otra tipo Neumann. Resolver un problema de este tipo implica estar en condiciones de decir en cualquier instante cual es la posición de la interfase y dar el correspondiente vector de distribución de la incógnita.

Formulación dimensional: (fig. 1)

Ecuación diferencial de conducción del calor no estacionaria:

$$a \frac{\partial^2 T'}{\partial x'^2} = \frac{\partial T'}{\partial t'} \quad \text{en } 0 < x' < s'(t') \text{ y } t' > 0 \quad (1)$$

Condiciones de borde:

En la interfase metal-molde:

$$k \frac{\partial T'}{\partial x'} = h (T' - T'_0) \quad \text{en } x' = 0 \text{ y } t' > 0 \quad (2)$$

En la interfase sólido-líquido:

$$\left. \begin{aligned} T' &= T'_F \\ k \frac{\partial T'}{\partial x'} &= \rho H \frac{ds'}{dt'} \end{aligned} \right\} \quad \text{en } x' = s'(t') \text{ y } t' > 0 \quad (3)$$

$$(4)$$

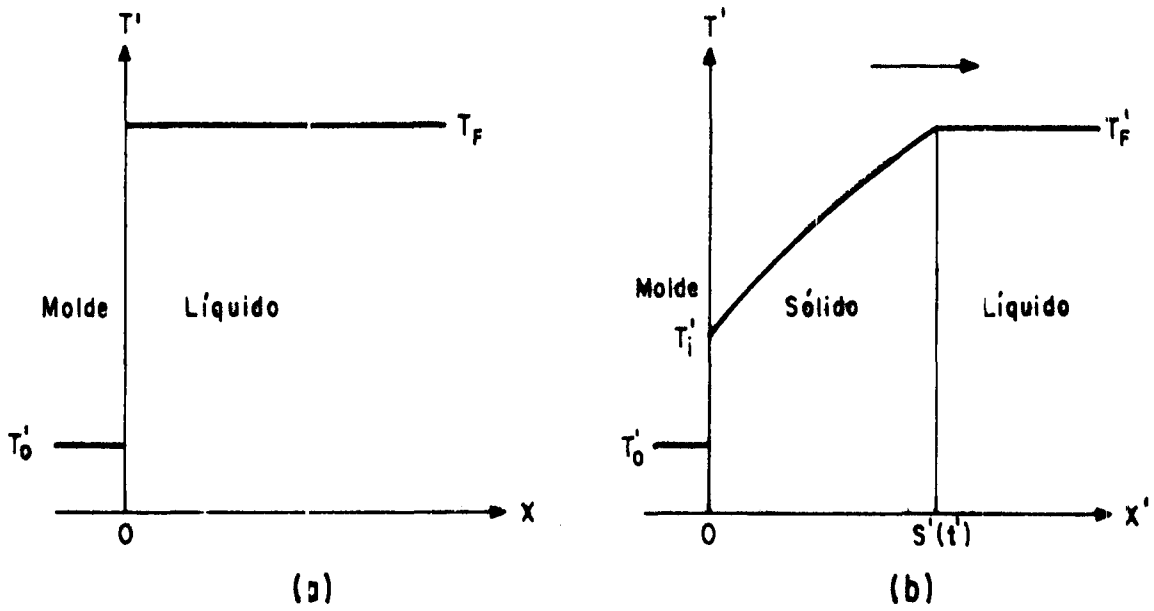


Fig. 1: Esquema de la distribución de temperaturas:
a) en el instante inicial ($t'=0$),
b) durante la solidificación ($t'>0$).

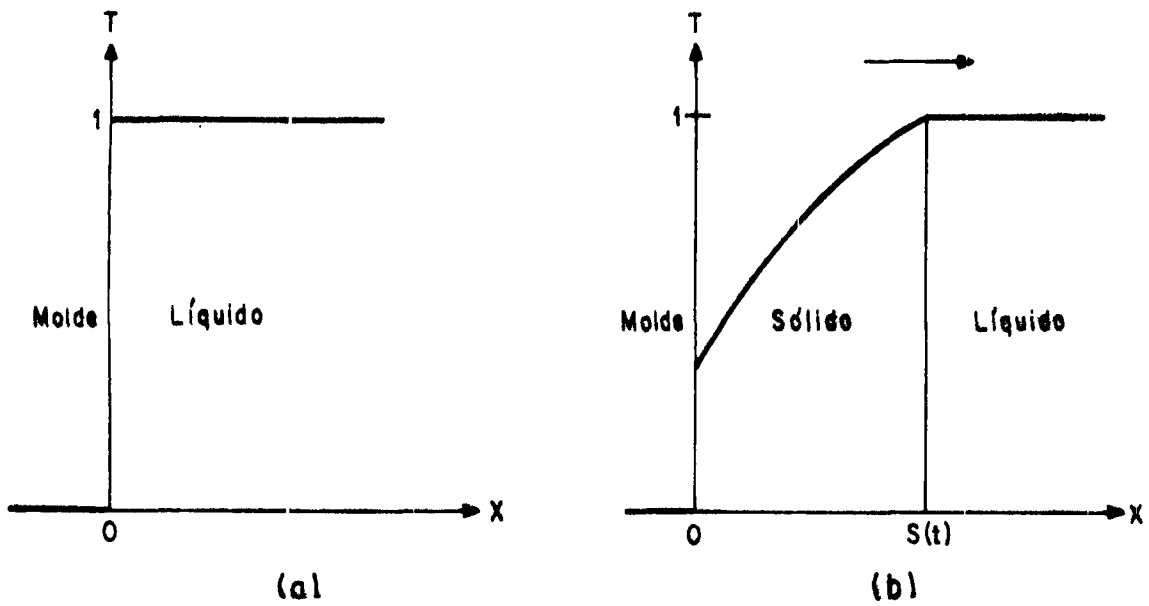


Fig. 2: Esquema de la distribución de temperaturas adimensionales:
a) en el instante inicial ($t=0$),
b) durante la solidificación ($t>0$)

Condición inicial:

$$s' = 0 \quad \text{en } t' = 0 \quad (5)$$

Formulación adimensional: (fig. 2)

Definiendo los parámetros adimensionales (ver sección Simbología):

$$x = \frac{x'}{l} ; \quad s = \frac{s'}{l} ; \quad t = \frac{at'}{l} ;$$

$$T = \frac{T' - T'_O}{T'_F - T'_O} ; \quad Ste = \frac{c(T'_F - T'_O)}{H} ; \quad Bi = \frac{hl}{k}$$

las ecuaciones (1) - (5) pueden escribirse:

Ecuación diferencial:

$$\frac{\partial^2 T}{\partial x^2} = \frac{\partial T}{\partial t} \quad \text{en } 0 < x < s(t) \text{ y } t > 0 \quad (6)$$

Condiciones de borde:

$$\frac{\partial T}{\partial x} = Bi \cdot T \quad \text{en } x=0 \text{ y } t > 0 \quad (7)$$

$$\left. \begin{array}{l} T = 1 \\ \frac{\partial T}{\partial x} = \frac{1}{Ste} \frac{ds}{dt} \end{array} \right\} \text{ en } x=s(t) \text{ y } t > 0 \quad (8)$$

Condición inicial:

$$s = 0 \quad \text{en } t = 0 \quad (10)$$

En rigor, el problema planteado puede adimensionalizarse mediante el uso de la distancia característica de significado físico $\frac{k}{h}$ que corresponde a la transición lineal-parabólica en el avance de la interfase, mejor que mediante la distancia característica de significado geométrico l (por ej.: semiancho de la lámina o plancha que solidifica).

Haciendo $l = \frac{k}{h}$ las ecuaciones (6) - (10) se simplifican ya que resulta:

$$Bi \rightarrow 1 ; \quad t \rightarrow \tau \text{ y } s \rightarrow \varepsilon.$$

Sin embargo, en la mayoría de los casos prácticos el metal líquido se encuentra inicialmente a mayor temperatura que la de fusión (metal con sobrecalentamiento), lo cual produce convección térmica. La transmisión de calor por convección es radicalmente diferente según se la considere en un recinto limitado o ilimitado (Mijeev y Mijeeva, 1979).

Para facilitar la comparación entre los resultados del presente trabajo con futuros estudios que tengan en cuenta la convección del metal líquido, se adoptó como longitud característica el valor del semiancho de la plancha o lámina que solidifica. En consecuencia, la solución numérica fue interrumpida en $s' = 1$ ($s = 1$).

3. METODO NUMERICO

El método numérico empleado en este trabajo para resolver la ecuación diferencial (6) con las condiciones de borde (7) a (9) y la condición inicial (10) es el de diferencias finitas implícito con malla variable. El intervalo o paso espacial Δx se mantiene fijo variando el paso temporal, de modo tal que el Δt elegido desde el nivel temporal actual sea el mejor (obtenido por iteración) a fin de que la interfase se desplace en un Δx (fig. 3).

De la condición de borde (9) se obtiene por discretización:

$$\frac{T_j - T_{j-1}}{\Delta x} = \frac{\Delta x}{Ste \Delta t_n} \quad (11)$$

donde T_j denota la temperatura en la interfase móvil y T_{j-1} la temperatura en el nodo inmediato anterior (fig. 4).

De la condición de borde (8):

$$T_j = 1 \quad (12)$$

$$\Delta t_n = \frac{\Delta x^2}{Ste (1 - T_{j-1})} \quad (13)$$

Esta fórmula, que permitirá calcular el intervalo temporal, es función de T_{j-1} que es una temperatura ya calculada. En consecuencia, el error que se cometa en el cálculo del vector temperaturas, afectará el valor de Δt_n , lo cual se traducirá en una desviación de la trayectoria de la interfase. Queda en claro la importancia del cálculo por iteración (dada la no linealidad del problema), de valores adecuados de Δt_n .

En lo que sigue el supraíndice k indicará sucesivas aproximaciones de $\Delta t_n^{(k)}$, es decir en un nivel temporal determinado. Se pensó conveniente tomar como Δt_n inicial (indicado $\Delta t^{(0)}$)⁽¹⁴⁾ el valor determinado en el paso temporal anterior

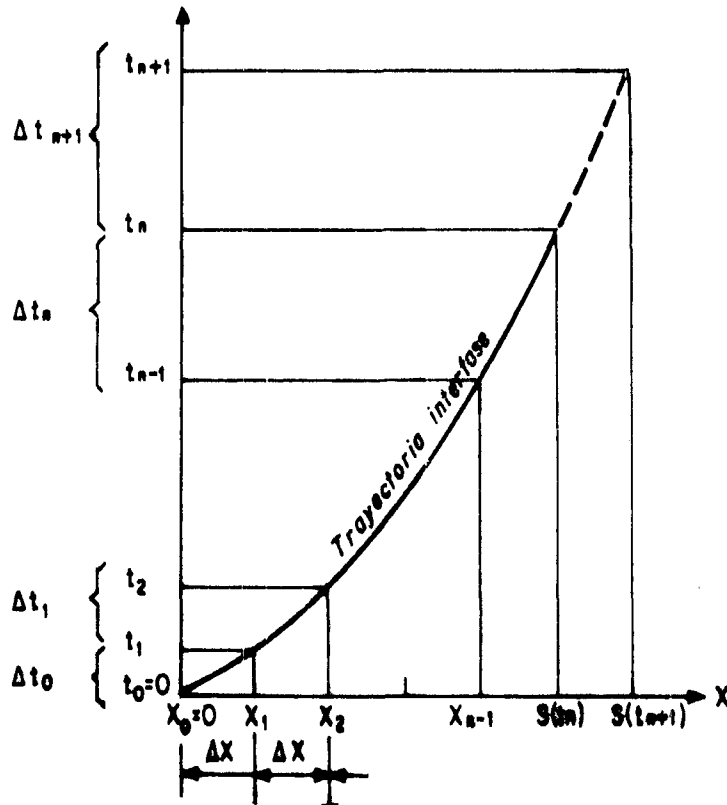


Fig. 3: Esquema de la malla variable utilizada para resolver el problema de Stefan unidimensional.

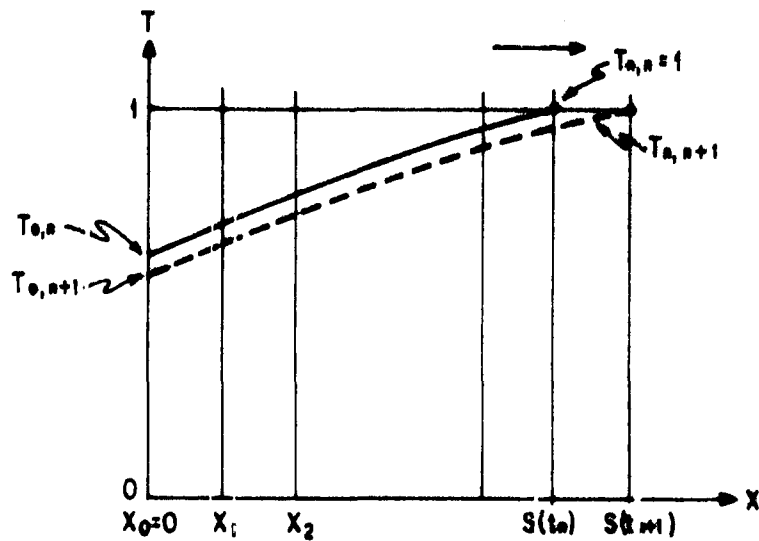


Fig. 4 : Perfil de temperaturas para los tiempos t_n y t_{n+1} .

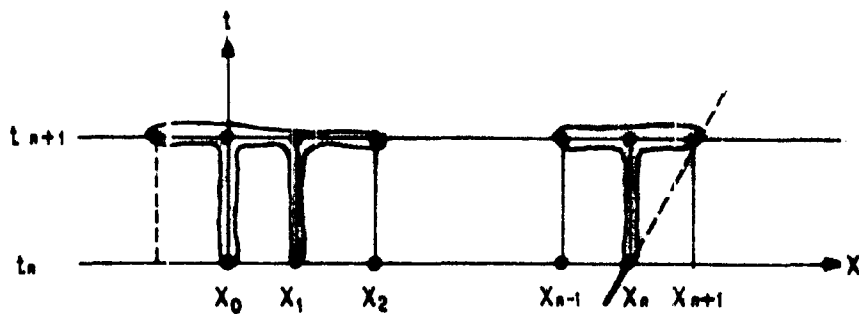


Fig. 5 : Esquema de cálculo para la resolución de la ecuación parabólica discretizada en forma implícita.

y a partir de él construir una sucesión de perfiles de temperatura y $\Delta t^{(k)}$ sucesivos, hasta que $\Delta t^{(k-1)}$ y $\Delta t^{(k)}$ difieran en menos de un valor prefijado.

De la discretización de la ecuación diferencial (6) resulta el esquema implícito:

$$-R \cdot T_{(i-1, n+1)} + (1 + 2R) T_{(i, n+1)} - R T_{(i+1, n+1)} = T_{i,n} \quad (15)$$

donde: $i = 1, 2, \dots, j-1$ (subíndice espacial)

$n = 1, 2, \dots, j$ (" temporal)

$$y \quad R = \frac{\Delta t}{\Delta x^2} \quad (16)$$

Variando i a través de los nodos de un nivel temporal (fig. 5), se obtiene un sistema de ecuaciones lineales algebraicas de forma tridiagonal que se resuelve con el algoritmo adecuado.

Así, calcular un perfil de temperaturas implica resolver un sistema lineal algebraico tridiagonal en cada nivel de tiempo. Un sistema lineal tridiagonal tiene solución única cuando su matriz es diagonal dominante (el valor absoluto del término diagonal supera a la suma de los valores absolutos de los términos de su fila). La matriz que resulta del esquema implícito mencionado anteriormente es:

$$\begin{pmatrix} 1 + 2R & -R & 0 & \dots & 0 \\ -R & 1 + 2R & -R & \dots & 0 \\ 0 & -R & 1 + 2R & \dots & 0 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & \dots & 0 & -R & 1 + 2R \end{pmatrix} \quad (17)$$

De la condición de borde (7), discretizando en forma descentrada, resulta, empleando un modo ficticio o:

$$\frac{T_1 - T_0}{\Delta x} = Bi T_1 \quad (18)$$

se deduce:

$$T_0 = T_1 (1 - Bi \Delta x) \quad (19)$$

Si en el esquema implícito (15) se hace $i = 1$ resulta:

$$-RT_{0, n+1} + (1+2R) T_{1, n+1} - RT_{2, n+1} = T_{1, n} \quad (20)$$

y reemplazando (19) en (20):

$$-R T_{1, n+1}(1-Bi \Delta x) + (1 + 2R) T_{1, n+1} - R T_{2, n+1} = T_{1, n} \quad (21)$$

$$T_{1, n+1} (1 + R (1 + Bi \Delta x)) - R T_{2, n+1} = T_{1, n} \quad (22)$$

De modo que la matriz (17) se transforma en:

$$\begin{pmatrix} 1 + R (1 + \Delta x \cdot Bi) & -R & 0 & \cdots & 0 \\ -R & (1+2R) & -R & \cdots & 0 \\ 0 & -R & (1+2R) & \cdots & 0 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & -R & 0 & \cdots & (1+2R) \end{pmatrix} \quad (23)$$

que sigue siendo diagonal dominante.

Del esquema general (15), para $i=j-1$ resulta:

$$-R T_{j-2, n+1} + (1+2R) T_{j-1, n+1} - RT_{j, n+1} = T_{j-1, n} \quad (24)$$

de donde la última ecuación del sistema lineal algebraico tridiagonal es:

$$-R T_{j-2, n+1} + (1 + 2R) T_{j-1, n+1} = T_{j-1, n} + R T_{j, n+1} \quad (25)$$

En el presente problema, la condición de borde (8) es:

$$T_{j, n+1} = 1 \quad (26)$$

Dado que el problema presentado se ha reducido a la resolución de sistemas lineales tridiagonales, falta explicar de qué manera se inicia el cálculo, es decir, cómo se obtuvieron el primer Δt y el primer vector solución (T_1, T_2) .

Por la condición de borde (7):

$$\frac{T_2 - T_1}{\Delta x} = Bi \cdot T_1 \quad (27)$$

$$T_1 = \frac{T_2}{1 + Bi \Delta x} = \frac{1}{1 + Bi \Delta x} \quad (28)$$

El primer perfil de temperaturas es, entonces:

$$(T_1, T_2) = \left(\frac{1}{1 + Bi \Delta x}, 1 \right) \quad (29)$$

Este primer perfil térmico se ubica en el tiempo de la siguiente manera:

De (7):

$$\frac{T_2 - T_1}{\Delta x} = Bi \cdot T_1 \quad (30)$$

De (9):

$$\frac{T_2 - T_1}{\Delta x} = \frac{1}{Ste} \frac{\Delta x}{\Delta t} \quad (31)$$

y siendo $T_2 = 1$, se puede despejar T_1 de (30) y (31) e igualar las expresiones obtenidas:

$$T_1 = \frac{T_2}{1 + \Delta x \cdot Bi} = T_2 - \frac{1}{Ste} \frac{\Delta x^2}{\Delta t}$$

$$T_2 = 1 \quad (32)$$

Combinando (30) a (32) resulta el primer incremento temporal:

$$\Delta t_1 = \frac{\Delta x}{Ste Bi} (1 + Bi \Delta x) \quad (33)$$

Es decir, este es el tiempo que necesita la interfase para recorrer el primer Δx . De esta manera se ubica el primer perfil de temperaturas y, a partir de éste, el programa irá calculando los restantes perfiles.

Los cálculos fueron efectuados en la computadora IBM 370-158 del Centro de Cálculo Científico de la Comisión Nacional de Energía Atómica, empleándose lenguaje FORTRAN y precisión simple .

Se estudió la influencia de los números adimensionales de Biot y de Stefan (en el rango: $10^{-2} < Bi < 10^{+2}$ y $10^{-1} < Ste < 10$) sobre la distribución de temperaturas $T(x,t)$ y la posición de la interfase sólido-líquido $0 < s(t) < 1$, confrontándose los resultados con la solución analítica exacta de Stefan y la aproximación analítica de Pires y colab.(1974).

4. RESULTADOS NUMERICOS

Con la finalidad de evaluar la técnica numérica empleada se estudió, primeramente, la distribución de temperaturas $T(x,t)$ y la cinética de la interfase sólido-líquido $S(t)$ para el caso en que $Bi \gg 1$ y se compararon los resultados con la solución analítica exacta de Stefan.

En la Tabla I se observan las temperaturas y tiempos calculados cuando la lámina ha solidificado completamente ($S=1$), para diferentes anchos de malla Δx , y se muestran además, los tiempos de cómputo (CPU) empleados. Para $\Delta x=0.01$ se obtuvo un error relativo menor que el 1% para el tiempo total de solidificación y menor que el 0,1% para las temperaturas calculadas, respecto de la solución de Stefan. Para $\Delta x=0.1$ los errores relativos se elevan a 6% y 1% respectivamente.

En la Tabla II se comparan los tiempos calculados, con los predichos por la solución de Stefan para $Bi \gg 1$, $Ste=10^{-1}$, 1 y 10; $S=0.1$, 0.2, 0.5 y 1, y $\Delta x=0.01$.

Los errores relativos cometidos disminuyen de 10% a 1% para espesores solidificados $S=0.1$ y $S=1$, respectivamente. Es decir los mayores errores se cometen en los primeros estadios de la solidificación, para los cuales la velocidad de la interfase es muy elevada.

En las figs. 6, 7 y 8 se muestra la posición de la interfase sólido-líquido $S(t)$ en función de la raíz cuadrada del tiempo, para $Ste=10^{-1}$, 1 y 10, y diferentes Bi . Estos resultados se graficaron en la fig. 9 en escala doble logarítmica, donde puede apreciarse la transición lineal-parabólica de la cinética de la interfase. Como se desprende de las figs. 6 a 9, la concordancia de la solución numérica con la aproximación analítica de Pires y colab. es satisfactoria sólo para números de Stefan bajos.

En la fig. 10 se grafica la distribución de temperatura para $Ste=1$, diferentes Bi y diferentes posiciones de la interfase. Se aprecia que la concordancia entre la solución numérica y la solución analítica de Stefan es excelente.

En la fig. 11 se muestran los perfiles térmicos cuando la lámina ha solidificado completamente ($S=1$), para diferentes Ste y Bi .

Una vez más se observa excelente concordancia con la solución analítica de Stefan. Los perfiles térmicos resultaron prácticamente lineales para números de Stefan bajos, cualquiera fuese el número de Biot.

En la fig. 12 se grafica el tiempo total de solidificación t_s (tiempo necesario para que la interfase alcance la posición $S=1$), en función del número de Biot para diferentes números de Stefan. Para $Bi > 10^2$ se llega a valores asintóticos de t_s (enfriamiento ideal).

5. DISCUSION Y CONCLUSIONES

Los resultados obtenidos en este informe de progreso, muestran que la técnica numérica empleada es satisfactoria para el estudio de la solidificación de metales en contacto térmico imperfecto con un sumidero de calor.

El método de malla variable, con paso espacial fijo y temporal variable, falla cuando la velocidad de la interfase tiende a cero, esto es, para bajos números

de Biot o tiempos largos. En estos casos es conveniente el empleo de una técnica alternativa: malla variable con paso temporal fijo y espacial variable, que a su vez falla cuando la velocidad de la interfase tiende a infinito (es decir, para elevados números de Biot o tiempos cortos).

En este trabajo se efectúa la confrontación de los resultados numéricos con una única aproximación analítica. La concordancia es satisfactoria. Sería muy valioso confrontarla, además, con otras soluciones aproximadas tales como la de Adams (1958), Megerlin (1966), Hills (1969), Ferreyra y Bertorello (1982), que además de la cinética de la interfase, predicen el perfil térmico de la fase sólida.

Otro estudio interesante sería el empleo de una aproximación parabólica para el cálculo de la velocidad de la interfase móvil, en lugar de la aproximación lineal (11) utilizada en este trabajo.

Por último, se hace notar que para la mayoría de los metales que solidifican en contacto con moldes refrigerados a temperatura ambiente, se cumple: $1,33 < Ste \times 4$ (Jones, 1969). Para estos casos los tiempos computados para la cinética de la interfase resultaron entre 10 a 25% respectivamente superiores a los predichos por la solución de Pires y colab. (1974).

Agradecimientos

Los autores desean expresar su agradecimiento a la Srta. G. Fernández del Departamento de Materiales, por el dactilografiado del original, y a los Sres. R. Stortoni y D. Peresas del Centro de Cálculo Científico y Departamento de Combustibles Nucleares, respectivamente, por la confección de los dibujos,

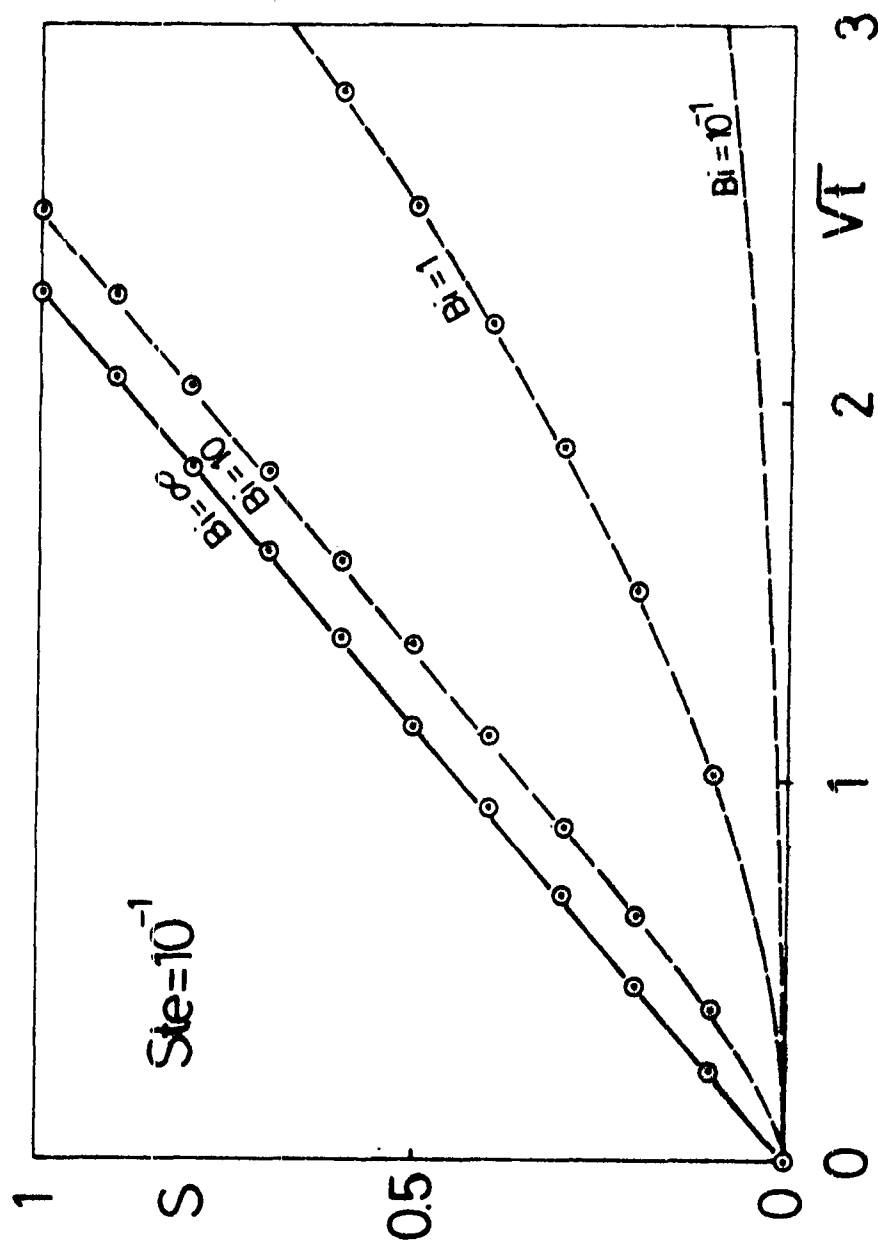


Fig. 6: Cinética de la interfase sólido-líquido $S(t)$, para $Ste=10^{-1}$ y diferentes Bi :

○ solución numérica ($\Delta x=10^{-2}$), — solución exacta de Stefan, (1891), ---- solución aproximada de Pires y colab. (1974).

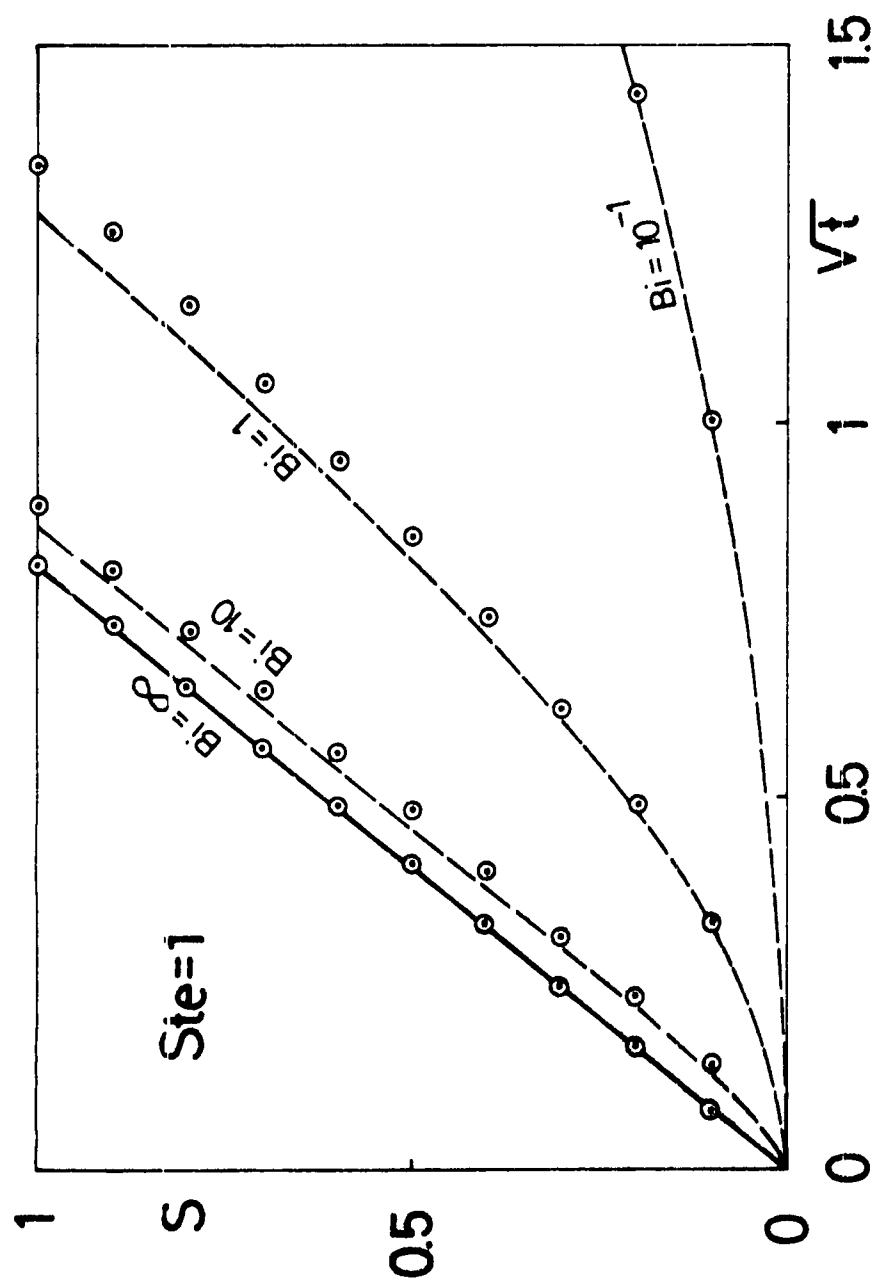


Fig. 7: Idem fig. 4 para $Ste = 1$.

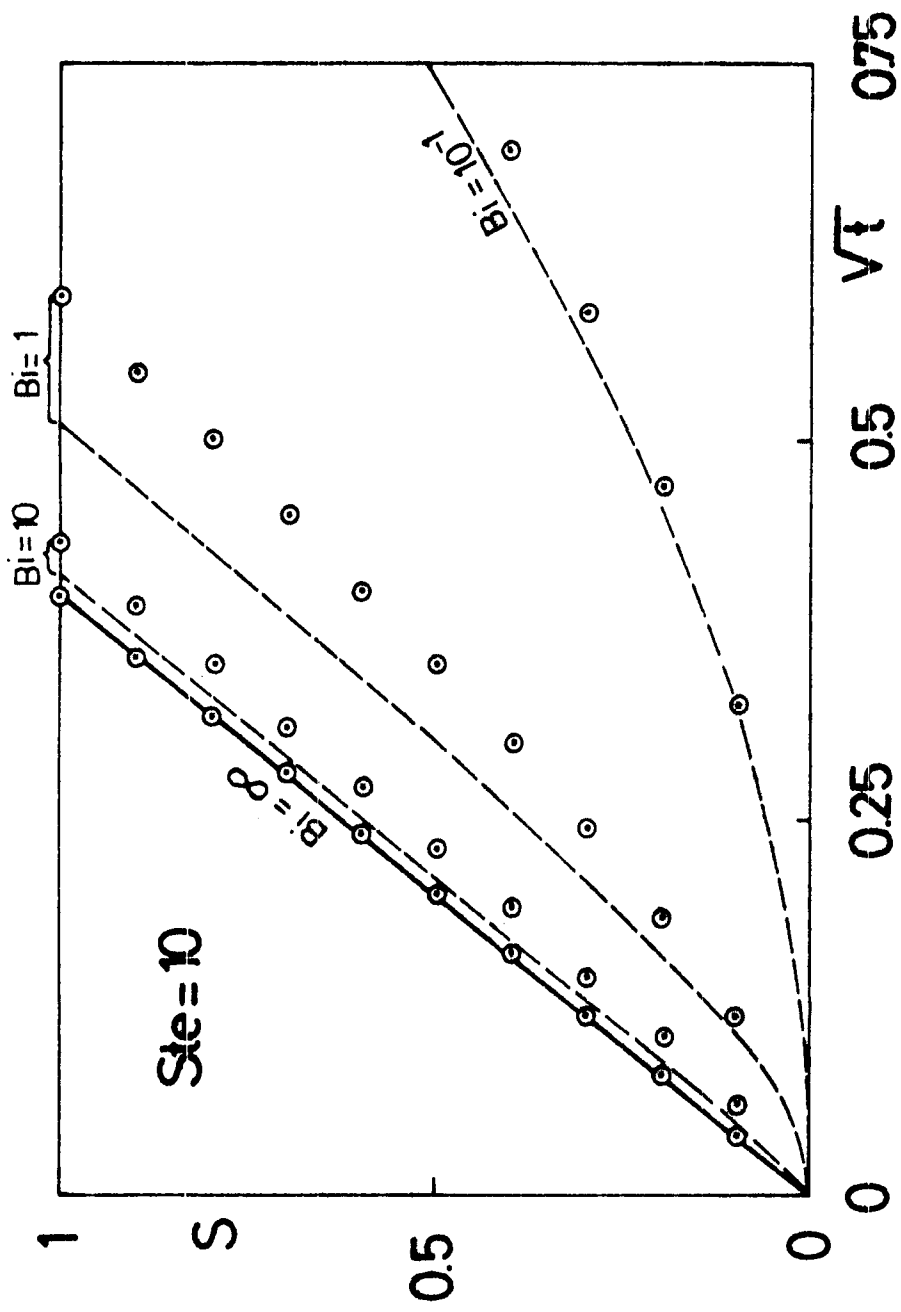


Fig. 8: Idem fig. 6 para $Ste = 10$.

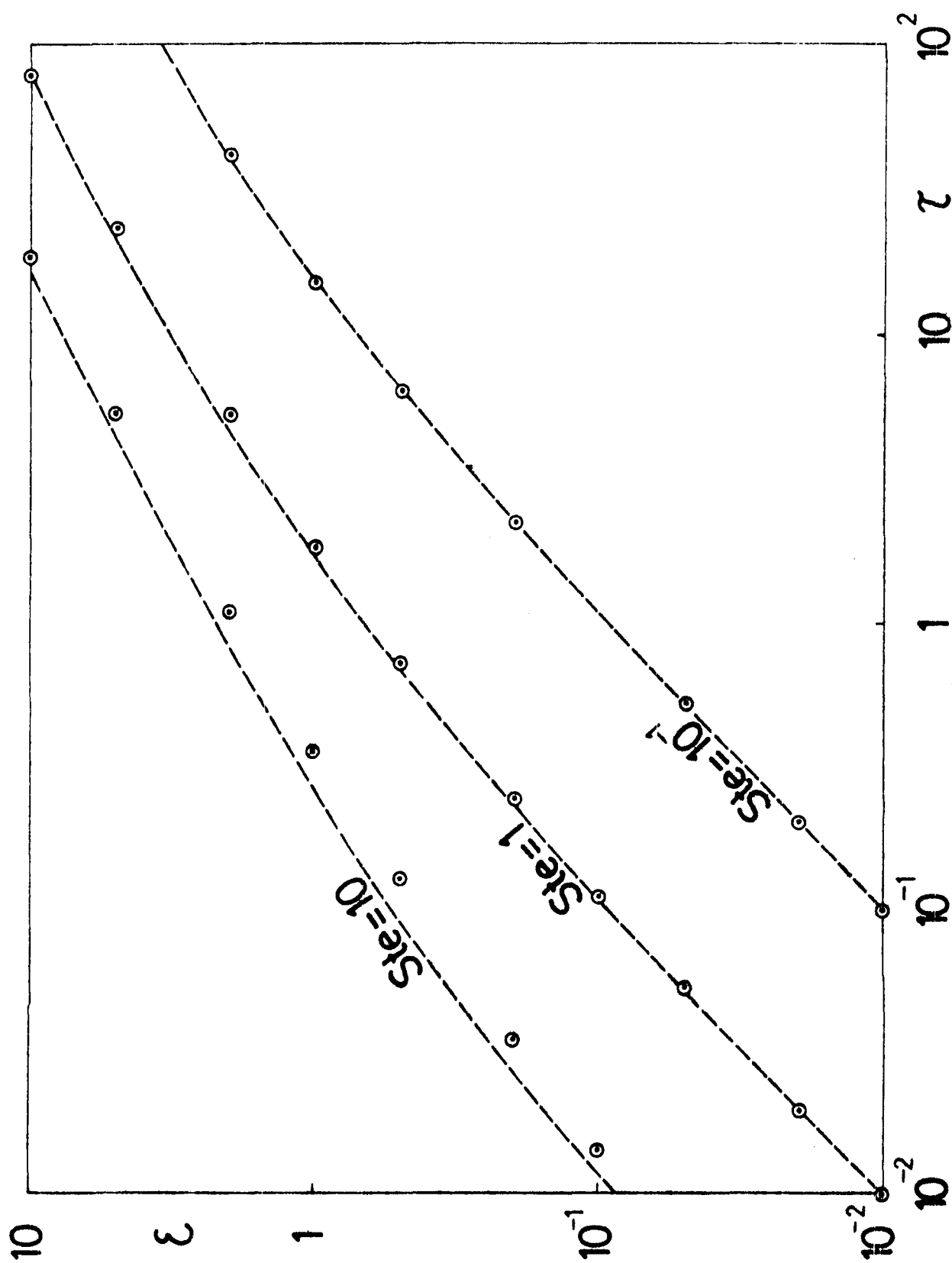


Fig. 9: Cinética de la interfase sólido-líquido $\epsilon(\tau)$ para diferentes Ste: $\odot$ solución numérica ($\Delta x = 0.01$) ---- solución aproximada de Pires y colab. (1974).

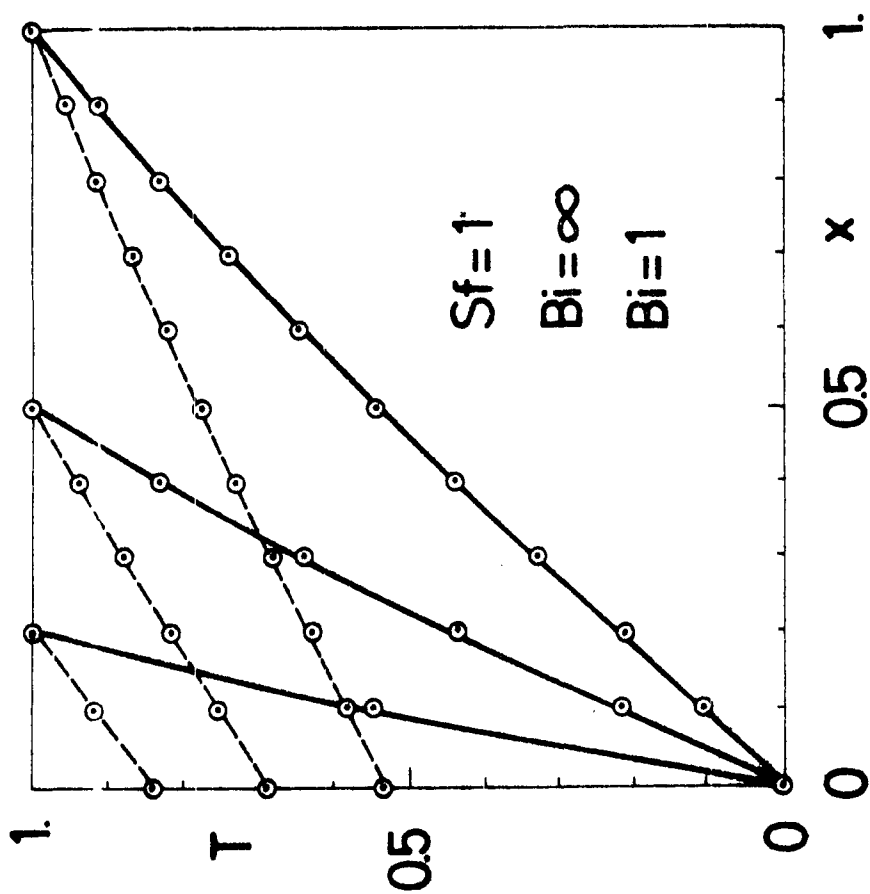


Fig. 10: Distribución de temperaturas para $Ste=1$, diferentes posiciones de la interfase sólido-líquido $S(t)$ y diferentes Bi : $\circ$ solución numérica ($\Delta x=10^{-2}$) — solución exacta de Stefan (1891), --- interpolación de valores numéricos.

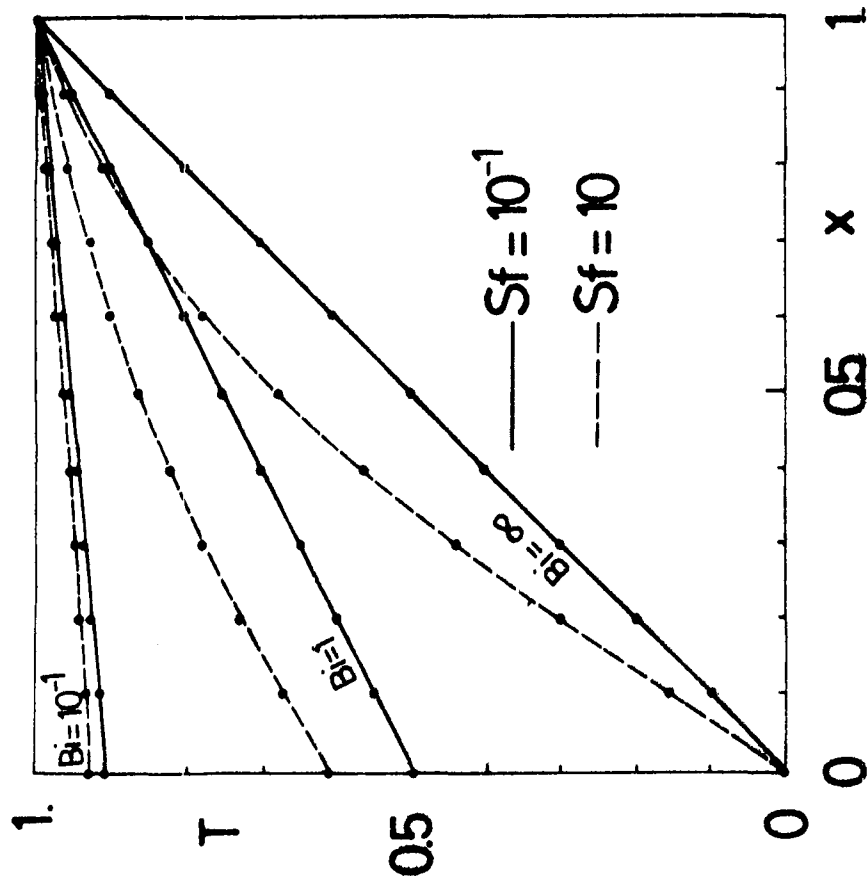


Fig. 11: Distribución de temperaturas para diferentes Ste y Bi , cuando la interfase alcanza la posición $S=1$.

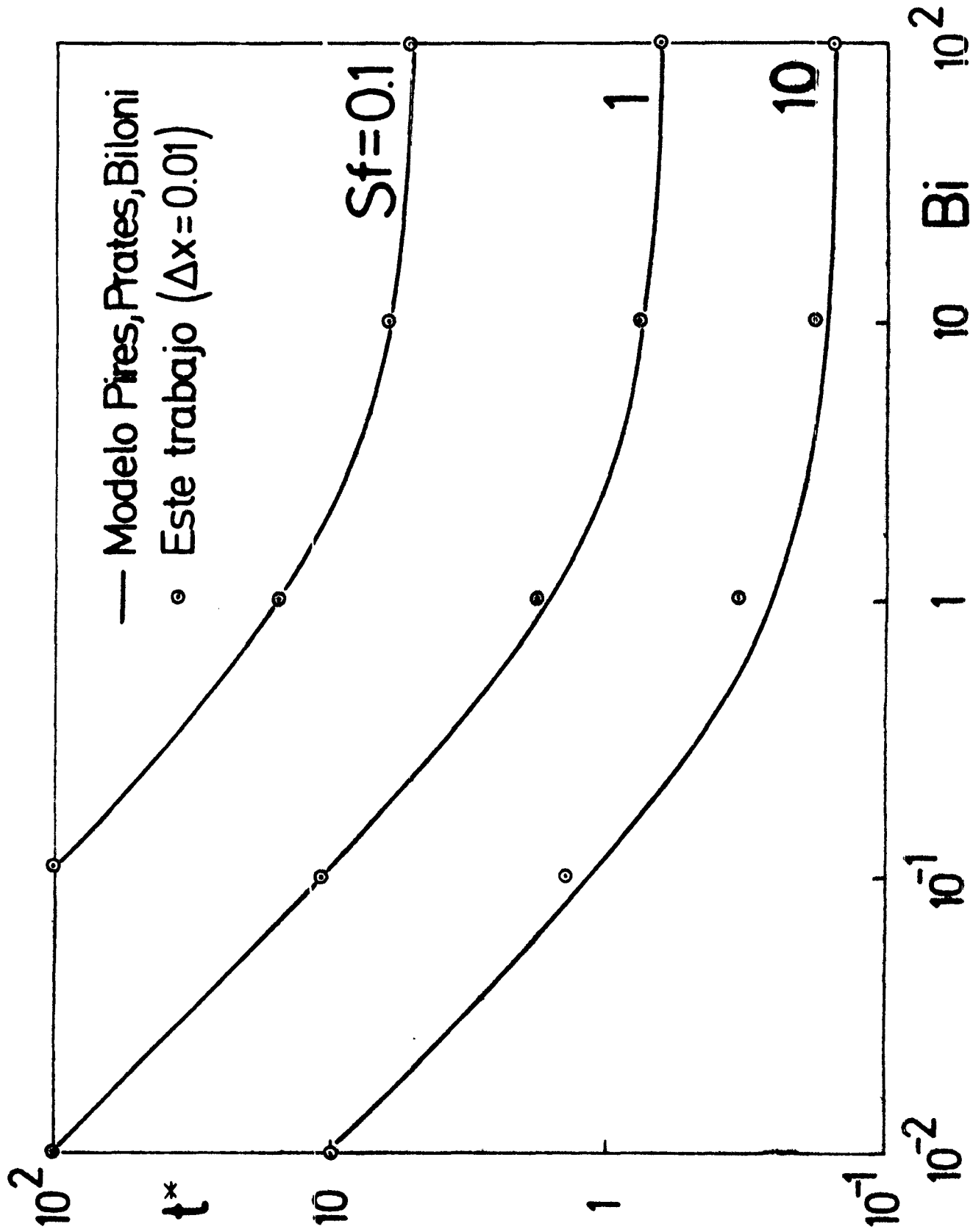


Fig. 12: Tiempo total de solidificación en función de Bi , para diferentes Ste :
 ○ solución numérica ($\Delta x = 10^{-2}$), — solución aproximada de Pires y colab. (1974).

APENDICE A:

Solución analítica exacta de Stefan, 1891:

Esta solución es válida cuando existe contacto térmico perfecto entre el metal que solidifica y el molde ($h = \infty$). En este caso, se reemplaza la condición de borde de tipo Cauchy (ecuación (2)) por la condición de tipo Dirichlet:

$$T' = T'_0 \quad \text{en } x' = 0 \text{ y } t' > 0 \quad (\text{A-1})$$

y en forma adimensional, la ecuación (7) cambia por:

$$T = 0 \quad \text{en } x = 0 \text{ y } t > 0 \quad (\text{A-2})$$

La solución analítica exacta de Stefan es (Carslaw y Jaeger, 1959):

$$T = \frac{\operatorname{erf}\left(\frac{x}{2\sqrt{t}}\right)}{\operatorname{erf}\phi} \quad \text{en } 0 < x < S(t) \text{ y } t > 0 \quad (\text{A-3})$$

$$S = 2\phi\sqrt{t} \quad \text{en } t > 0 \quad (\text{A-4})$$

donde ϕ es una constante que se determina por iteración a partir de la ecuación trascendente (fig. A-1):

$$\sqrt{\pi}\phi \operatorname{erf}\phi \exp(\phi^2) = \operatorname{Ste} \quad (\text{A-5})$$

Para $\operatorname{Ste} \ll 1$, resulta: $\phi \ll 1$, $\operatorname{erf}\phi \sim \frac{2\phi}{\sqrt{\pi}}$ y $\exp(\phi^2) \sim 1$, con lo cual la ecuación (A-5) se reduce a:

$$\phi = \sqrt{\frac{\operatorname{Ste}}{2}} \quad (\text{A-6})$$

APENDICE B:

Solución analítica exacta de Flemings, 1974:

Esta solución límite propuesta entre otros por Flemings, es válida cuando la conductividad térmica del sólido es infinita ($k = \infty$).

El tratamiento matemático es trivial dado que la única caída de temperatura es la discontinuidad en la interfase metal-molde:

$$T = 1 \quad \text{en} \quad 0 < \chi < \epsilon(\tau) \quad (\text{B-1})$$

$$\epsilon = \text{Ste} \tau \quad \text{en} \quad \tau > 0 \quad (\text{B-2})$$

APENDICE C:

Modelo analítico aproximado de Pires y colab., 1974:

Este modelo describe exclusivamente la cinética de la interfase sólido-líquido, combinando las soluciones límites de Stefan y de Flemings:

$$\tau = \frac{\epsilon^2}{4\phi^2} + \frac{\epsilon}{\text{Ste}} \quad \text{en} \quad \tau > 0 \quad (\text{C-1})$$

Para $\text{Ste} \ll 1$ el modelo de Pires y colab. coincide con la solución analítica aproximada de London y Seban, 1943 (usando la expresión (A-6)):

$$\tau = \frac{\epsilon^2}{2\text{Ste}} + \frac{\epsilon^2}{\text{Ste}} \quad \text{en} \quad \tau > 0 \quad (\text{C-2})$$

$$T = \frac{1 + \chi}{1 + \epsilon} \quad \text{en} \quad 0 < \chi < \epsilon(\tau) \quad (\text{C-3})$$

SIMBOLOGIA

a	difusividad térmica del sólido (m^2/s)
Bi	número adimensional de Biot ($= hl/k$)
c	calor específico del sólido ($J/Kg\ ^\circ C$)
h	coeficiente de transferencia calórica newtoniana en la interfase metal-molde ($J/m^2s\ ^\circ C$)
H	calor latente de solidificación del metal (J/Kg)
k	conductividad térmica del sólido ($J/m\ s\ ^\circ C$)
l	longitud característica (ej.: semiancho de la pancha o lámina que solidifica (m))
R	coeficiente que resulta de la discretización de la ecuación diferencial parabólica
s	posición adimensional de la interfase sólido-líquido ($= s'/l$)
s'	posición de la interfase solido-líquido (m)
Ste	número adimensional de Stefan ($= c(T'_F - T'_O)/H$)
t	tiempo adimensional o número adimensional de Fourier ($= at'/l^2$)
t_s	tiempo adimensional de solidificación de la lámina ($t(s=1)$)
t'	tiempo (s)
T	temperatura adimensional ($= (T' - T'_O)/(T'_F - T'_O)$)
T_i	temperatura adimensional del sólido en la interfase sólido-molde ($= (T'_i - T'_O)/(T'_F - T'_O)$)
T'	temperatura en el sólido ($^\circ C$)
T'_F	temperatura de fusión del metal ($^\circ C$)
T'_i	temperatura del sólido en la interfase sólido-molde ($^\circ C$)
T'_O	temperatura del molde ($^\circ C$)
x	coordenada espacial adimensional ($= x'/l$)
x'	coordenada espacial (m)
X	coordenada espacial adimensional ($= x'h/k$)
ρ	densidad del sólido (Kg/m^3)
ϕ	constante adimensional de la solución analítica exacta de Stefan (ecuación A-5)
ϵ	posición adimensional de la interfase sólido-líquido ($= hs'/k$)
τ	tiempo adimensional ($= h^2 at'/k^2$)

TABLA I: Comparación entre las temperaturas y tiempos calculados para $Bi=10^3$, $Ste=1$, $S=1$ y diferentes ΔX , con los predichos en la solución analítica de Stefan (1891):

$X \backslash \Delta X$	0.1	0.05	0.01	0.005	Stefan
0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
0.2	0.2279	0.2260	0.2250	0.2255	0.2248
0.4	0.4479	0.4448	0.4431	0.4438	0.4427
0.6	0.6531	0.6498	0.6481	0.6488	0.6477
0.8	0.8382	0.8361	0.8350	0.8353	0.8347
1.0	1.0	1.0	1.0	1.0	1.0
t	0.6916	0.6804	0.6557	0.6488	0.6502
CPU (seg)	0.025	0.050	0.58	1.24	

TABLA II: Comparación entre los tiempos calculados para $Bi=10^3$, $\Delta X=0.01$ y diferentes S y Ste , con los predichos por la solución analítica de Stefan (1891).

Ste	S t	0.1	0.2	0.5	1
0.1	calculado	5.69×10^{-2}	0.2171	1.317	5.215
0.1	Stefan	5.16×10^{-2}	0.2066	1.231	5.164
1	calculado	6.96×10^{-3}	2.69×10^{-2}	0.1653	0.6557
1	Stefan	6.50×10^{-3}	2.60×10^{-2}	0.1626	0.6502
10	calculado	1.72×10^{-3}	6.39×10^{-3}	3.95×10^{-2}	0.1574
10	Stefan	1.58×10^{-3}	6.33×10^{-3}	3.96×10^{-2}	0.1582

REFERENCIAS

- C.M. Adams: "Thermal considerations in freezing", en "Liquid Metals and Solidification", American Society for Metals Seminar Proc., Cleveland, pp. 174-186, (1958).
- H. Biloni: "Transferencia calórica en el sistema metal-molde: su influencia sobre la estructura y propiedades de metales y aleaciones", Ciencia Interamericana, Vol. 18, Nº3 y 4, pp. 3-13, (1977).
- A. Caracino, G. Marshall y E.A. Moyano: "Sobre la solución numérica del problema de Stefan unidimensional", CNEA-NT 22/81, Comisión Nacional de Energía Atómica, Buenos Aires, (1981).
- H.S Carslaw y J. C. Jaeger: "Conduction of heat in solids", 2nd., Oxford University Press, London, (1975).
- J. Crank: "The mathematics of diffusion", 2nd., Oxford University Press, London, (1975).
- J. Douglas y T.M. Gallie: "On the numerical integration of parabolic differential equations subject to a moving boundary condition", Duke Math. J., Vol. 22, pp. 557-570, (1955).
- A. Ferreyra y H. Bertorello: "Solidificación unidireccional de metales puros con contacto imperfecto en la interfase metal-molde", Jornadas de Metalurgia, Vaquerías, Córdoba, Vol. 2, pp. 323-348, (1982).
- M. C. Flemings: "Solidification processing", Mc. Graw-Hill, New York, (1974).
- J.S. Goodling y M.S. Khader: "One-dimensional inward solidification with a convective boundary condition", APS Cast Metals Res. J., March, pp.26-29, (1974).
- R.S. Gupta y D. Kumar: "A modified variable time step method for the one-dimensional Stefan problem", Comp. Meth. Appl. Mech. Engng., Vol. 23, pp. 101-109, (1980).
- A.W.D. Hills: "A generalized integral-profile method for the analysis of unidirectional heat flow during solidification", Trans. Metall. Soc. of AIME, Vol. 245, pp. 1471-1479, (1969).
- H. Jones: "A comparison of approximate and analytical solutions of freezing from a plane chill", J. Inst. Metals, Vol. 97, pp.38-43, (1969).
- A.L. London y R.A. Seban: "Race of ice formation", Trans. ASM, Vol. 64, pp. 771- , (1943).
- F. Megerlin: "Geometrisch eindimensionale Wärmeleitung beim Schmelzen und Erstarren", Ph. D. Thesis, Tech, Hochschule, Aachen, (1966).

M. A. Mijeev y I. M. Mijeeva: "Fundamentos de termotransferencia", Mir, Moscú, pp. 104-111, (1979).

O. S. Pires, M. Prates y H. Biloni: "Unidirectional solidification of metals with zero superheat. Case of cooled molds", Z. Metallkunde, Vol. 65, pp. 143-149, (1974).

M. Prates y H. Biloni: "Métodos de análisis de extracción calórica durante la solidificación: Soluciones analíticas aproximadas", PMM/R-59, Programa Multinacional de Metalurgia OEA-CNEA, (1971).

M. Prates, J. Fissolo y H. Biloni: "Heat flow parametes affecting the unidirectional solidification of pure metals", Metall. Trans., Vol. 3, pp. 1419 -1425, (1972).

J. Stefan: "Über die Theorie der Eisbildung, insbesondere über die Eisbildung in Polarmeeren", Ann. Phys. Chem., Vol. 42, p. 269, (1891), (citado por Carslaw y Jaeger).

E. E. Vicente y M. J. A. Solari: "Transferencia de calor y masa durante la solidificación de grandes lingotes", Seminario sobre Problemas de Transferencia de Calor y Materia en la Industria Nuclear, Cuaderno N° 8 del CAMAT, pp. 325-356, (1981).