4. FUNDAMENTOS DEL TRATAMIENTO NUMÉRICO DEL CAMBIO DE FASE

En el anterior capítulo se exploraron las soluciones analíticas, de donde se ve claramente que pueden ser aplicadas para un número limitado de casos y que en algunas circunstancias pueden resultar irreales. Por tanto el empleo de métodos numéricos para la solución de los problemas de cambio de fase es ineludible.

Las dos formas más empleadas para abordar numéricamente la solución de los problemas de cambio de fase son las de "capacidad térmica efectiva" y la de la "entalpia"(Lamberg, 2003).

El método de la capacidad térmica efectiva, consiste en considerar que la capacidad térmica del material es variable con la temperatura, de tal manera que cuando el material se encuentra a la temperatura de cambio de fase, el calor específico del material aumenta a un nivel tal que la energía necesaria para cambiar en un ΔT la temperatura sea igual a la energía necesaria para que el material cambie de fase. Este artificio obliga a que se establezca un rango en el cual el fenómeno de cambio de fase ocurre. Estrictamente no se puede aplicar a las sustancias puras, dado que en ellas, el cambio de fase ocurre a temperatura constante, sin embargo, el error cometido en esos casos es pequeño.

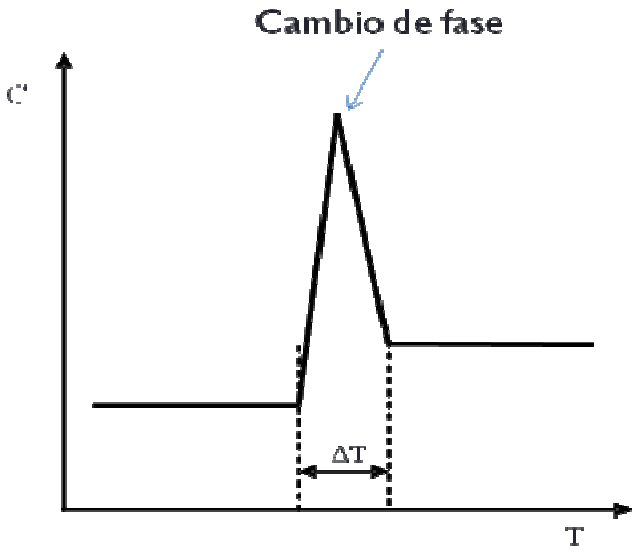

Figura 33. Evolución de la capacidad térmica en función de la temperatura para el método de la capacidad térmica efectiva

En el método de la capacidad térmica efectiva se puede utilizar una sola ecuación para todo el dominio, sólo que sus parámetros serán dependientes de la temperatura.

$$\frac{\partial}{\partial x}\left(k(T)\frac{\partial T(x,t)}{\partial x}\right) = \rho(T)\cdot C(T)\frac{\partial T(x,t)}{\partial t}$$

Ésta es la ecuación de calor que habitualmente resuelven los programas comerciales de simulación por volúmenes o elementos finitos.

El método de la entalpia consiste en acumular la entalpía del material a medida que aumenta su temperatura. Para la temperatura de cambio de fase se establece una incremento de entalpia igual al calor latente de cambio de fase. Por razones de continuidad en este caso también es necesario establecer un rango en el cual ocurre el cambio de fase.

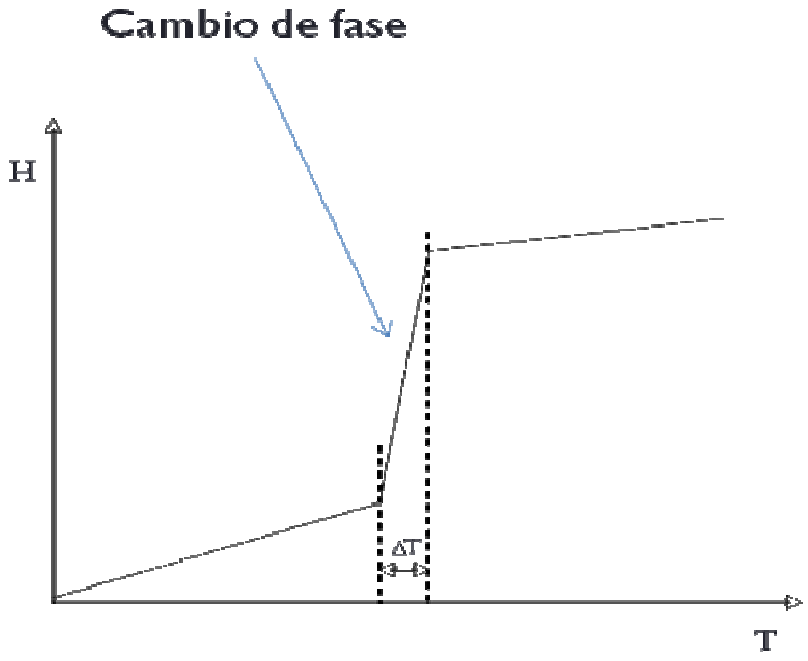

Figura 34. Evolución de la entalpía en función de la temperatura para el método de la entalpía

En el método de la entalpía también se puede utilizar una sola ecuación para todo el dominio con parámetros dependientes de la temperatura

$$\frac{\partial}{\partial x}\left(k(T)\frac{\partial T(x,t)}{\partial x}\right)=\frac{\partial H(T)}{\partial t}$$

Ésta es otra forma de la ecuación de calor, pero que no siempre incluyen los programas comerciales de simulación.

Se ha seleccionado el método de la capacidad térmica efectiva debido a que es más fácil de implementar en la mayoría de los programas comerciales.

El movimiento de los límites de la superficie de cambio de fase presenta especial dificultad para los procedimientos numéricos, ya que la posición de los límites depende del campo de temperaturas que es desconocido; por lo que la localización de los límites de las fases no son conocidos a priori y se debe tener un cuidadoso seguimiento durante el procedimiento de cálculo.