

Contribución al Modelado Matemático y la Simulación Numérica de Procesos de Soldadura

Mario Freire Torres¹, Jaime Carpio Huertas²

¹Departamento de Ingeniería Energética, Escuela Técnica Superior de Ingenieros Industriales, Universidad Politécnica de Madrid, España. Email: mario.freire.torres@alumnos.upm.es

²Departamento de Ingeniería Energética, Escuela Técnica Superior de Ingenieros Industriales, Universidad Politécnica de Madrid, España. Email: jaime.carpio@upm.es

Resumen

En el presente trabajo se describe un modelo matemático para la simulación numérica del proceso de soldadura. Inicialmente el dominio Ω es un sólido al que se va comunicando calor en determinadas zonas. Este calor aumenta la temperatura del sólido y al alcanzarse la temperatura de fusión del material se produce el cambio de fase del mismo. A la temperatura de fusión existe una mezcla entre líquido y sólido (modelado como medio poroso) y por encima de la temperatura de fusión nos encontraremos solamente con líquido. En el líquido se pueden producir corrientes de convección natural debido a la flotabilidad inducida por el campo gravitatorio. Para representar convenientemente toda la fenomenología descrita, el modelo matemático se basará en la ecuación de la conservación de la energía, expresada de forma conservativa en términos de la entalpía, junto con las ecuaciones de conservación de masa y cantidad de movimiento para determinar la velocidad del fluido. La resolución numérica de las ecuaciones se realizará con una formulación de Lagrange-Galerkin, donde se utilizará un esquema BDF2 de discretización temporal y el método de elementos finitos como esquema de discretización espacial.

Palabras clave: problemas de soldadura, procesos térmicos con cambio de fase; simulación numérica; esquema Lagrange-Galerkin; método de los elementos finitos.

Abstract

The present work describes a mathematical model for the numerical simulation of the welding process. Initially, the domain Ω is solid to which the heat is released in certain areas. This heat increases the temperature of the solid, and when the fusion temperature is reached, the phase change occurs. At the fusion temperature, there is a mixture between liquid and solid (modelled as a porous medium); above this temperature mentioned; we will find only liquid. Natural convection currents can occur in the liquid due to buoyancy induced by the gravitational field. In order to conveniently represent all the phenomenology described, the mathematical model will be based on the energy conservation equation, expressed conservatively in terms of enthalpy, together with the mass and momentum conservation equations to determine the velocity of the fluid. The numerical resolution of the equations will be carried out with a Lagrange-Galerkin formulation, where a temporal discretization BDF2 scheme will be used, and the finite element method will be used as a spatial discretization scheme.

Keywords: welding problems; thermal processes with phases changes; numerical simulation; Lagrange-Galerkin scheme; finite element method.

1. Introducción

La soldadura es uno de los procesos de fabricación más importantes en el mundo de la metalurgia, éstos se

encuentran presentes en la industria debido a su versatilidad al momento de unir partes de estructuras complejas, brindando ventajas tanto económicas como tecnológicas. Muchos de los problemas de soldadura

conlleven la aplicación de fuentes de calor de gran potencia, razón por la cual da lugar al apareamiento de complejos procesos físicos y químicos de toda índole.

Los problemas que generan los procesos de soldadura son de gran interés tanto para la industria como para los centros de investigación, ya que conocer el comportamiento del material durante todo el proceso permite el control y la optimización, siendo especialmente crucial en grandes empresas de manufactura con producción en masa.

Con el desarrollo de las técnicas computacionales, la industria de la soldadura y metalurgia ha apostado por la modelización matemática de los procesos físicos que caracterizan el fenómeno y la posterior resolución numérica del mismo que logre simular el comportamiento termo mecánico de las variables físicas que intervienen en el proceso de fabricación [1].

En este trabajo se va a considerar el esquema de la Figura 1 para analizar el proceso de soldadura. Una fuente de calor va recorriendo un sólido y va comunicando una potencia calorífica que hace aumentar la temperatura del mismo. Cuando se alcanza la temperatura de fusión del material T_F el sólido empieza a fundirse pasando algunas zonas a parte líquida. En la zona de fusión la temperatura se mantiene constante y el calor se emplea en el cambio de fase, apareciendo una zona de mezcla (llamada en inglés ‘mushy region’), donde coexisten la fase líquida y la sólida. Cuando localmente todo el sólido se ha fundido, el líquido resultante puede seguir aumentando su temperatura al recibir calor (o por el contrario el líquido se va solidificando si cede calor a otras partes del sólido o al ambiente). La zona fundida al aumentar su temperatura $T > T_F$ y en presencia del campo gravitatorio empieza a generar corrientes convectivas debido a la flotabilidad inducida por la gravedad.

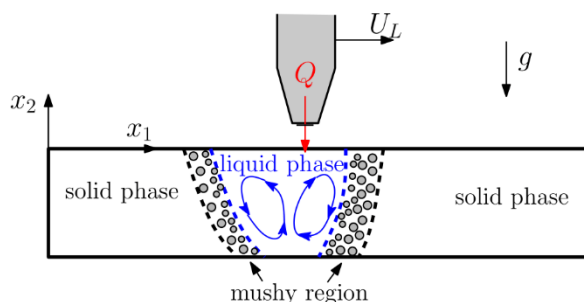


Figura 1. Esquema del proceso de soldadura considerado en este trabajo. Fuente: elaboración propia.

Para estudiar este fenómeno se realizará una modelización conjunta de las tres zonas que pueden aparecer en el dominio (fase sólida, fase líquida y zona de mezcla). Para ello, se plantea la ecuación de

conservación de la energía, expresada de forma conservativa en términos de la entalpía, junto con ecuaciones de conservación de masa y cantidad de movimiento para determinar la velocidad del fluido cuando aparezca. Se hace notar que la mayoría de los modelos presentados en la literatura formulan la ecuación de la energía únicamente en términos de la temperatura. Un planteamiento que es erróneo si se quiere describir con realismo la zona de fusión en materiales puros que se mantienen a temperatura constante mientras sucede el cambio de fase.

Son numerosos los métodos numéricos empleados para resolver numéricamente problemas de naturaleza metalúrgica, como el método de Galerkin para elementos libres [2], método de Petrov-Galerkin [3], método de volúmenes finitos [4] y método de elementos finitos [5]. En este trabajo se ha utilizado un esquema de características Lagrange-Galerkin [6] [7] [8] [9], para resolver el modelo matemático.

El método numérico hará uso de un esquema temporal de tipo BDF2 (en inglés, Backward Differentiation Formula) cuya tasa de convergencia alcanza el orden $\mathcal{O}(\Delta t^2)$, mejorando así a las tasas de convergencia de trabajos previos presentes en la literatura cuyos valores alcanzan el orden $\mathcal{O}(\Delta t)$, equivalente a un esquema tipo Euler implícito. Como discretización espacial se utilizará el método de elementos finitos con polinomios cuadráticos, alcanzando tasas de convergencia espacial del orden $\mathcal{O}(h^3)$ para soluciones regulares. Como en este caso, las interfaces pueden producir discontinuidades en las variables fluidas, esta convergencia cae, el uso de refinamiento local de malla se hace imprescindible. En este trabajo se utilizarán técnicas de adaptación de malla con elementos anisótropos [8] [9].

2. Metodología

2.1. Ecuaciones que modelan el fenómeno

En esta sección se presenta el modelo matemático que va a describir el fenómeno de soldadura descrito en la introducción y mostrado esquemáticamente en la Figura 1.

2.1.1. Ecuaciones de conservación de masa y cantidad de movimiento

En primer lugar se plantean las ecuaciones de conservación de la masa y cantidad de movimiento para calcular el campo de velocidades de la fase líquida. Para simplificar el modelo se considerará que la densidad del sólido y del líquido es la misma, un valor constante que no depende ni de la temperatura ni del estado tensional del sólido.

Para la ecuación de la cantidad de movimiento, asumimos que el líquido se comporta como un fluido newtoniano con viscosidad constante y la variación de la densidad por cambios de la temperatura solamente se retienen en el término de flotabilidad según el modelo de Boussinesq en la zona fundida. Por otro lado, para modelar el flujo de fluido a través de medios porosos, se ha considerado también el modelo de Darcy [10]. Quedando las ecuaciones como:

$$\begin{cases} \nabla \cdot \mathbf{v} = 0 \\ \rho \left(\frac{\partial \mathbf{v}}{\partial t} + \mathbf{v} \cdot \nabla \mathbf{v} \right) = -\nabla p + \mu \Delta \mathbf{v} - \rho \beta (T - T_F) \mathbf{g} - \frac{\mu}{K} \mathbf{v} \end{cases} \quad (1)$$

En el sistema de ecuaciones (1), $\mathbf{v} = \{v_1, v_2, \dots, v_d\}$ es el vector de velocidad del fluido, para nuestro caso en particular, como el estudio es bidimensional, tenemos que, $d = 2$, \mathbf{g} es el vector de la aceleración gravitatoria, p es la presión hidrostática, y T es la temperatura. Además, ρ es la densidad constante tanto para líquido como para sólido, μ es la viscosidad dinámica, β es el coeficiente de expansión térmica y T_F es la temperatura de fusión, donde la fase líquida comienza a aparecer. Finalmente, K es la permeabilidad porosa de la zona mixta o de mezcla de fases, que se modelizará como un medio poroso, cuyo modelo lo describe la ecuación de Carman-Kozeny [11].

$$K = K_0 \frac{Y_L^3}{(1-Y_L)^2}, \text{ con } K_0 = \frac{d_0^2}{180} \quad (2)$$

donde K_0 la permeabilidad porosa básica y d_0 el diámetro promedio de una partícula sólida, que considerará la zona mixta compuesta por una matriz regular de granos esféricos sumergidos en el material líquido, siendo Y_L la fracción másica de líquido.

Las ecuaciones (1) son validas en el dominio completo, es decir, para las tres zonas definidas (sólida, líquida y mixta). Para la zona sólida la solución es $\mathbf{v} = \mathbf{0}$, donde $Y_L = 0$ y $K = 0$, para la zona líquida quedarán activadas las ecuaciones de Navier-Stokes, donde $Y_L = 1$ y $K \rightarrow +\infty$; finalmente, para la zona mixta donde la temperatura es constante $T = T_F$, el modelo se reduce a la ecuación de Darcy.

Las ecuaciones mencionadas se completan con la condición inicial a tiempo $t = 0$, partiendo de la zona sólida con $\mathbf{v} = \mathbf{0}$, y condición de contorno donde también se considera que $\mathbf{v} = \mathbf{0}$ en $\partial\Omega$.

2.1.2. Ecuación de conservación de la energía

La ecuación de conservación de la energía, se formula como:

$$\rho \left(\frac{\partial h}{\partial t} + \nabla \cdot (h\mathbf{v}) \right) = \nabla \cdot (\lambda \nabla T) + Q \quad (3)$$

donde λ es la conductividad térmica, y Q es una fuente de calor volumétrica conocida, ya sea ésta de tipo láser o de arco eléctrico. Se considera que λ se encuentra definido por partes, con valores constantes, tanto para la zona sólida λ_S como para la zona líquida λ_L .

Para la descripción de los problemas en soldadura, la entalpía h , se revela como la variable de estado más apropiada para describir la zona mixta, donde coexisten las fases sólida y líquida. El valor de la entalpía h es la suma de una parte relacionada con el calor sensible y otra con el latente, así:

$$dh = dh_{\text{sen}} + dh_{\text{lat}} = c dT + H_F dY_L \quad (4)$$

El valor de la entalpía h es una función de la temperatura T , de la fracción de líquido Y_L , del calor específico c y del calor latente de fusión H_F . En el presente estudio, se considerará el valor del calor latente de fusión constante, y el calor específico c se define por partes: c_S para la zona sólida, y c_L para la zona líquida.

$$h = \begin{cases} c_S(T - T_0); & T < T_F, & Y_L = 0 \\ h_S + H_F Y_L; & T = T_F, & 0 < Y_L < 1 \\ h_L + c_L(T - T_F); & T > T_F, & Y_L = 1 \end{cases} \quad (5)$$

donde T_0 es la temperatura ambiente, y T_F es la temperatura de fusión. Además, se define $h_S = c_S(T_F - T_0)$ como la entalpía del límite sólido y $h_L = c_S(T_F - T_0) + H_F$ como la entalpía del límite líquido. La definición de la entalpía en (5) permite calcular la temperatura T y la fracción másica de líquido Y_L , como función única de la entalpía de forma monótona y univaluada. Lo que será fundamental para la resolución numérica de la ecuación.

$$T = \begin{cases} T_0 + \frac{h}{c_S}; & h \leq h_S, \\ T_F; & h_S < h < h_L, \\ T_F + \frac{h-h_L}{c_L}; & h \geq h_L, \end{cases} \quad (6)$$

$$Y_L = \begin{cases} 0; & h \leq h_S, \\ \frac{h-h_S}{h_L-h_S}; & h_S < h < h_L, \\ 1; & h \geq h_L, \end{cases} \quad (7)$$

Además, de nuevo para facilitar la convergencia del método numérico resulta conveniente definir una nueva variable auxiliar $du = \lambda(T)dT$, que estará definida como:

$$u = \begin{cases} \lambda_S(T - T_0); & T \leq T_F, \\ \lambda_S(T_F - T_0) + \lambda_L(T - T_F); & T > T_F, \end{cases} \quad (8)$$

Por último, las ecuaciones se completan con condiciones iniciales y de contorno. Para $t = 0$ se

considera un medio sólido, $Y_L = 0$, a temperatura ambiente, $T = T_0$ (con entalpía $h = 0$). Las condiciones de contorno pueden ser impuestas como la temperatura en el contorno Γ_D de tipo Dirichlet, o un flujo de calor impuesto, como la pérdida de calor debido a los mecanismos de convección en el contorno Γ_R de tipo Robin.

$$T = T_0, \quad \text{en } \Gamma_D, \quad (9)$$

$$-\lambda \frac{\partial T}{\partial n} = \alpha(T - T_0), \quad \text{en } \Gamma_R. \quad (10)$$

2.1.3. Formulación adimensional

Con la finalidad de caracterizar mejor el fenómeno físico es conveniente formular adimensionalmente el problema. Esta formulación muestra el orden de magnitud de los términos de las ecuaciones, y cuáles son realmente relevantes para caracterizar el problema. Definimos las variables adimensionales como:

$$\begin{aligned} \rho^* &= 1; \quad \lambda^* = \frac{\lambda}{\lambda_S}; \quad \mathbf{r}^* = \frac{\mathbf{r}}{L_0}; \quad \mathbf{v}^* = \frac{\mathbf{v}}{U_0}; \quad t^* = \frac{U_0}{L_0} t \\ p^* &= \frac{p}{\rho U_0^2}; \quad h^* = \frac{h}{c_S(T_F - T_0)}; \quad \theta = \frac{T - T_0}{T_F - T_0}. \end{aligned} \quad (11)$$

Donde L_0 es la longitud característica, y U_0 es la velocidad característica del problema. Definidas las variables adimensionales en (11), las ecuaciones diferenciales a resolver (1) y (3), quedan como:

$$\left\{ \begin{aligned} \nabla^* \cdot \mathbf{v}^* &= 0, \\ \frac{\partial \mathbf{v}^*}{\partial t^*} + (\mathbf{v}^* \cdot \nabla^*) \mathbf{v}^* &= \\ -\nabla^* p^* + \frac{1}{\text{Re}} \Delta^* \mathbf{v}^* + \frac{\text{Gr}}{\text{Re}^2} (\theta - 1) \mathbf{e}_{x_2} - \frac{1}{\text{ReDa}} \frac{(1 - Y_L)^2}{Y_L^3} \mathbf{v}^*, & \\ \frac{\partial h^*}{\partial t^*} + \nabla^* \cdot (\mathbf{v}^* h^*) &= \frac{1}{\text{Pe}} \Delta^* u^* + Q^* \end{aligned} \right. \quad (12)$$

donde aparecen los siguientes números adimensionales: Reynolds Re , Grashof Gr , Darcy Da y Peclet Pe .

$$\text{Re} = \frac{\rho U_0 L_0}{\mu}, \quad \text{Gr} = \frac{\rho^2 g \beta L_0^3 (T_F - T_0)}{\mu^2}, \quad \text{Da} = \frac{K_0}{L_0^2}, \quad \text{Pe} = \frac{\rho c_S L_0 U_0}{\lambda_S} \quad (13)$$

De la misma forma, las condiciones de contorno (9) y (10) se reescriben de la siguiente forma.

$$\left\{ \begin{aligned} \mathbf{v}^* &= \mathbf{0}; & \text{en } \partial\Omega \\ \theta &= 0; & \text{en } \Gamma_D \\ -\lambda^* \frac{\partial \theta}{\partial n^*} &= \text{Nu } \theta; & \text{en } \Gamma_R \end{aligned} \right. \quad (14)$$

Donde Nu es el número de Nusselt, definido como:

$$\text{Nu} = \frac{\alpha L_0}{\lambda_S} \quad (15)$$

Y las relaciones (6), (7) y (8) se reescriben:

$$\theta(h^*) = \begin{cases} h^*; & h^* \leq 1 \\ 1; & 1 < h^* < 1 + \frac{1}{\text{Ste}} \\ 1 + \left[h^* - \left(1 + \frac{1}{\text{Ste}} \right) \right] \frac{c_S}{c_L}; & h^* \geq 1 + \frac{1}{\text{Ste}} \end{cases} \quad (16)$$

$$Y_L(h^*) = \begin{cases} 0; & h^* \leq 1 \\ (h^* - 1) \text{Ste}; & 1 < h^* < 1 + \frac{1}{\text{Ste}} \\ 1; & h^* \geq 1 + \frac{1}{\text{Ste}} \end{cases} \quad (17)$$

$$u^*(\theta) = \begin{cases} \theta; & \theta \leq 1 \\ \frac{\lambda_L}{\lambda_S} (\theta - 1) + 1; & \theta > 1 \end{cases} \quad (18)$$

En estas relaciones aparece un número adimensional de suma importancia en estos problemas de cambio de fase, el número de Stefan que se define como:

$$\text{Ste} = \frac{c_S(T_F - T_0)}{H_F} \quad (19)$$

De ahora en adelante, se omitirá el asterisco (*) en las variables que lo llevan, para no recargar la notación de forma innecesaria. Por lo tanto, a partir de ahora todas las variables que aparezcan serán adimensionales.

2.2. Método numérico

Para la resolución numérica del modelo matemático propuesto se utilizará la formulación conservativa del esquema Lagrange-Galerkin. Después de esto, se procederá a la discretización temporal y espacial, que nos conducirá al problema matricial a resolver.

Las variables incógnitas del problema serán \mathbf{v}, p, h , y como variables auxiliares tendremos θ, Y_L, u .

2.2.1. Discretización y resolución de la ec. de la energía

Si se multiplica la ecuación de la energía por la función test φ y se integra en un dominio móvil $\tilde{\Omega}$, se llega a la siguiente ecuación integro-diferencial.

$$\frac{d}{dt} \int_{\tilde{\Omega}} h \varphi dX + \frac{1}{\text{Pe}} \int_{\tilde{\Omega}} \nabla u \cdot \nabla \varphi dX + \frac{\text{Nu}}{\text{Pe}} \int_{\Gamma_R} \theta \varphi d\sigma = \int_{\tilde{\Omega}} Q \varphi dX, \quad \forall \varphi \in V_0, \quad (20)$$

Con $V_0 = \{\phi \in H^1(\Omega): \phi|_{\Gamma_D} = 0, \text{ y } D\phi/Dt = 0\}$.

Estando el dominio móvil $\tilde{\Omega}(t)$ definido por la trayectoria de las partículas fluidas $\mathbf{X}(\mathbf{x}, t_n; t)$ calculada como:

$$\begin{cases} \frac{d\mathbf{X}(\mathbf{x}, t_n; t)}{dt} = \mathbf{v}(\mathbf{X}(\mathbf{x}, t_n; t), t); & t < t_n \\ \mathbf{X}(\mathbf{x}, t_n; t_n) = \mathbf{x}, \end{cases} \quad (21)$$

donde $\mathbf{X}(\mathbf{x}, t_n; t)$ representa la posición de la partícula fluida para instantes $t < t_n$ que en el instante t_n alcanzará el punto \mathbf{x} del dominio Ω , como puede verse en la Figura 2.

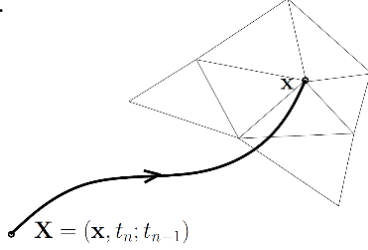


Figura 2. Representación esquemática de la trayectoria de la partícula fluida que parte de $\mathbf{X}(\mathbf{x}, t_n; t_{n-1})$ para llegar a \mathbf{x} . Fuente: elaboración propia.

Como la velocidad del fluido en el contorno del dominio satisface $\mathbf{v}|_{\partial\Omega} = \mathbf{0}$, el dominio quedará invariante $\Omega \equiv \tilde{\Omega}(t) \quad \forall t < t_n$.

El siguiente paso es discretizar la ecuación anterior en el tiempo y posteriormente en el espacio. Para llevar a cabo la discretización temporal, se aplicará un esquema BDF2 de segundo orden $\mathcal{O}(\Delta t^2)$ obteniéndose la correspondiente formulación débil del problema. Conocidas las variables para los instantes previos t_{n-1} y t_{n-2} debemos encontrar la función incógnita $h(t_n) = h^n \in V_0$ que satisfice.

$$\begin{cases} 3(h^n, \varphi)_\Omega + \frac{2\Delta t}{\text{Pe}} (\nabla u^n, \nabla \varphi)_\Omega + \frac{2\Delta t \text{Nu}}{\text{Pe}} (\theta^n, \varphi)_{\Gamma_R} = \\ (f^n, \varphi)_\Omega, \quad \forall \varphi \in V_0, \end{cases} \quad (22)$$

donde

$$f^n = 2\Delta t Q^n + 4h^{n-1}(\mathbf{X}^{n-1}(\mathbf{x})) - h^{n-2}(\mathbf{X}^{n-2}(\mathbf{x})).$$

En la ecuación (22), se ha empleado la notación estándar del producto escalar para reemplazar las integrales y también se ha empleado la notación

compacta para $\mathbf{X}^{n-i}(\mathbf{x})$ como el pie de la curva característica en el instante t_{n-i} , $\mathbf{X}^{n-i}(\mathbf{x}) \equiv \mathbf{X}(\mathbf{x}, t_n; t_{n-i})$. Estas curvas características son calculadas con un método de Runge-Kutta de orden 2 (siendo coherente con la discretización del BDF2) usando a su vez, una extensión lineal de la velocidad definida por las velocidades previas $\mathbf{v}^{n-1}(\mathbf{x})$ y $\mathbf{v}^{n-2}(\mathbf{x})$.

Para obtener un problema de dimensión finita se pasa a trabajar con un espacio funcional discreto V_h , asociado a una triangulación o malla del dominio seleccionado Ω , denotada por \mathbb{T}_h . El espacio V_h se encuentra formado por polinomios a trozos que son cuadráticos en cada elemento $K \in \mathbb{T}_h$ de la triangulación. Consideramos una base $\{\varphi_i\}_{i=1}^{N_n}$ de V_h , donde cada φ_i es la función de base nodal asociada al nodo i del malla. De esta manera, buscamos las funciones incógnita discretas $h_h^n, \theta_h^n, u_h^n, Y_{Lh}^n \in V_h$ y se satisfice.

$$h_h^n(\mathbf{x}) = \sum_{i=1}^{N_n} h_i^n \varphi_i(\mathbf{x}),$$

$$\theta_i^n = \theta(h_i^n), \quad Y_{Li}^n = Y_L(h_i^n), \quad u_i^n = u(\theta_i^n) \quad (23)$$

Una vez introducida la discretización de Galerkin de elementos finitos, la formulación débil (22) se puede escribir de forma matricial. Conocidos los datos $\bar{h}^{n-1}, \bar{h}^{n-2} \in \mathbb{R}^{N_n}$, así como la aplicación para calcular $\mathbf{X}^{n-1}(\mathbf{x})$ y $\mathbf{X}^{n-2}(\mathbf{x})$, el objetivo será encontrar los vectores $\bar{h}^n, \bar{\theta}^n, \bar{u}^n \in \mathbb{R}^{N_n}$, tales que:

$$\begin{cases} 3\bar{M}\bar{h}^n + \frac{2\Delta t}{\text{Pe}} \bar{R}\bar{u}^n + \frac{2\Delta t \text{Nu}}{\text{Pe}} \bar{M}_{\Gamma_R} \bar{\theta}^n = \bar{f}^n \\ \theta_i^n = \theta(h_i^n); & \forall i = 1, \dots, N_n, \\ u = u(\theta_i^n); & \forall i = 1, \dots, N_n, \end{cases} \quad (24)$$

Con las componentes de las matrices y de los vectores calculados como.

$$M_{ij} = (\varphi_i, \varphi_j)_\Omega, \quad R_{ij} = (\nabla \varphi_i, \nabla \varphi_j)_\Omega, \quad M_{\Gamma_R ij} = (\varphi_i, \varphi_j)_{\Gamma_R}$$

Algoritmo: Algoritmo de tipo Newton para resolver la ec. conservación de la energía

Datos Para el instante de tiempo t_n , son conocidos $\bar{h}^{n-1}, \bar{h}^{n-2}$, y la tolerancia de parada del algoritmo Tol_{Nw} .

Inicializar $\bar{h}_0^n = \bar{h}^{n-1}$, $error_{Nw} = 1$, $k = 0$;

Evaluar $\theta_{0i}^n = \theta(h_{0i}^n)$ y $u_{0i}^n = u(\theta_{0i}^n)$;

mientras $error_{Nw} > Tol_{Nw}$ **hacer**

Calcular $d\bar{h}_{k+1}^n$ resolviendo: $\bar{J}_k^n d\bar{h}_{k+1}^n = -\bar{F}_k^n$;

Calcular $error_{Nw} = \|\bar{h}_{k+1}^n - \bar{h}_k^n\|_2$;

Incrementar $k = k + 1$;

Actualizar $h_{k+1}^n = \bar{h}_k^n + d\bar{h}_{k+1}^n$;

Actualizar $\theta_{ki}^n = \theta(h_{ki}^n)$ y $u_{ki}^n = u(\theta_{ki}^n)$;

fin

Resultado $\bar{h}^n = \bar{h}_k^n$, $\theta_i^n = \theta(h_i^n)$ y $u_i^n = u(\theta_i^n)$.

Figura 3. Algoritmo de tipo Newton para la resolución de la ec. conservación de la energía. Fuente: elaboración propia.

$$f_i^n = (2\Delta t Q^n + 4h^{n-1}(\mathbf{x}^{n-1}(\mathbf{x})) - h^{n-2}(\mathbf{x}^{n-2}(\mathbf{x})), \varphi_i)_\Omega \quad (25)$$

Con esta definición de matrices (25), se puede introducir el algoritmo de resolución de Newton, que se muestra en la Figura 3.

donde las matrices y los vectores del método de Newton se escriben como:

$$\begin{cases} \bar{F}_k^n = 3\bar{M}\bar{h}_k^n + \frac{2\Delta t}{Pe}\bar{R}\bar{u}_k^n + \frac{2\Delta t Nu}{Pe}\bar{M}_{\Gamma_R}\bar{\theta}_k^n - \bar{f}^n, \\ \bar{J}_k^n = 3\bar{M} + \frac{2\Delta t}{Pe}\bar{R}\bar{D}_k^u + \frac{2\Delta t Nu}{Pe}\bar{M}_{\Gamma_R}\bar{D}_k^\theta, \end{cases} \quad (26)$$

Las matrices \bar{D}_k^ϕ que aparecen en (26), son matrices diagonales, que se irán actualizando en cada iteración del algoritmo. Para ello, se tienen en cuenta las relaciones (16) y (18), quedando.

$$\begin{aligned} D_{k,ij}^u &= \frac{du}{d\theta}\Big|_{\theta_{k,i}^n} \frac{d\theta}{dh}\Big|_{h_{k,i}^n} \delta_{ij} = \lambda(\theta_{k,i}^n) \frac{d\theta}{dh}\Big|_{h_{k,i}^n} \delta_{ij}, \\ D_{k,ij}^\theta &= \frac{d\theta}{dh}\Big|_{h_{k,i}^n} \delta_{ij}. \end{aligned} \quad (27)$$

2.2.2. Discretización y resolución de la ec. de conservación de masa y cantidad de movimiento

El mismo formalismo que se aplicó a la ecuación de la energía, se puede aplicar a las ecuaciones que determinan el movimiento del fluido. Aplicando un esquema de Lagrange-Galerkin, se puede reducir el problema no lineal de Navier-Stokes a un problema lineal de Stokes, sobre el que se aplica también un esquema de discretización temporal BDF2. La formulación débil del problema consiste en encontrar en t_n las funciones $\mathbf{v}^n \in (W_0)^2$ y $p^n \in L^2(\Omega)$, tales que:

$$\begin{cases} 3(\mathbf{v}^n, \mathbf{w})_\Omega + \frac{2\Delta t}{Re}(\nabla \mathbf{v}^n, \nabla \mathbf{w})_\Omega + \frac{2\Delta t}{Re Da} \left(\frac{(1-Y_L^n)^2}{Y_L^{n3}} \mathbf{v}^n, \mathbf{w} \right)_\Omega = \\ 2\Delta t(p^n, \nabla \cdot \mathbf{w})_\Omega + (f_v^n, \mathbf{w})_\Omega, & \forall \mathbf{w} \in (W_0)^2, \\ (\nabla \cdot \mathbf{v}^n, q)_\Omega = 0, & \forall q \in L^2(\Omega), \end{cases} \quad (28)$$

donde

$$f_v^n = 4\mathbf{v}^{n-1}(\mathbf{x}^{n-1}(\mathbf{x})) - \mathbf{v}^{n-2}(\mathbf{x}^{n-2}(\mathbf{x})) + \frac{2\Delta t Gr}{Re^2}(\theta^n - 1)\mathbf{e}_{x_2}.$$

el espacio funcional $W_0 = \{\phi \in H^1(\Omega): \phi|_{\partial\Omega} = 0\}$ que tiene en cuenta las condiciones de contorno homogéneas para la velocidad. A partir de la resolución de la ecuación de la energía, expuesta con anterioridad, son conocidas en el tiempo t_n las propiedades termodinámicas h^n , θ^n , Y_L^n ; por lo que las únicas incógnitas de (28) a despejar son la velocidad \mathbf{v}^n y la presión p^n . Para la discretización espacial se utilizarán

elementos finitos del tipo Taylor-Hood P2/P1, cuadráticos para la velocidad y lineales para la presión para satisfacer la condición de Ladyzhenskaya-Babuska-Brezzi.

Finalmente, el sistema lineal de matrices obtenido mediante la discretización espacial será resuelto con un algoritmo de gradiente conjugado con preconditionador de Uzawa [12] [13] [14].

2.2.3. Refinamiento local de malla

Por último, para terminar con la sección dedicada a la discretización y resolución numérica de las ecuaciones, dedicaremos unas líneas a comentar el refinamiento local de malla utilizado para resolver el problema.

El objetivo principal de las técnicas de adaptación de malla es construir para cada instante de tiempo t_n un mado \mathbb{T}_h^n con el menor número de grados de libertad y que permita tener una descripción lo más precisa posible de la solución que se quiere hallar. Para ello, hay que definir un mado más denso en aquellas zonas donde el error numérico cometido sea mayor. Eso se consigue construyendo un indicador del error cometido, que se puede calcular a posteriori utilizando la solución numérica. Además, otra información valiosa que aporta la solución numérica es si existe presencia de alguna orientación espacial característica. Es habitual en problemas de Mecánica de Fluidos la presencia de capas límites, chorros, capas de mezcla, ..., motivo por el cual se pueden orientar los elementos del mado siguiente esas direcciones, dando lugar al desarrollo de mados anisótropos. En la Figura 4, se puede observar un esquema de un elemento anisótropo $K \in \mathbb{T}_h^n$. Para ser definido se requiere conocer su tamaño, forma y orientación, características que se recogen en el llamado tensor métrico \mathbf{M}_K que se define como:

$$\mathbf{M}_K = |K|^{-2/d} \mathbf{R}_K \mathbf{S}_K^{-1} \mathbf{R}_K^T, \quad (29)$$

donde el escalar $|K|$ define el tamaño del elemento; la matriz $\mathbf{R}_K = \{\mathbf{r}_{1,K}, \dots, \mathbf{r}_{d,K}\}$, con $\mathbf{r}_{i,K} \cdot \mathbf{r}_{j,K} = \delta_{ij}$, identifica las direcciones principales (orientación) del elemento K ; y la matriz de factores de forma $\mathbf{S}_K = \text{diag}\{s_{1,K}, \dots, s_{d,K}\}$. La definición de esta última está relacionada con el cociente de las longitudes que definen los ejes del elipsoide circunscrito al elemento $s_{i,K} = \lambda_{i,K}^2 (\prod_{j=1}^d \lambda_{j,K})^{-2/d}$, para $i = 1, \dots, d$.

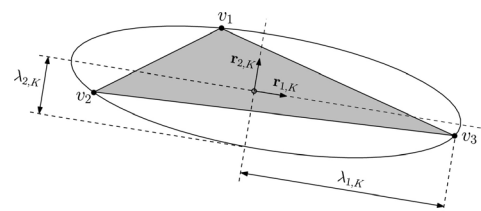


Figura 4. Parámetros que definen el elemento triangular anisótropo bidimensional K que estarán recogidos en el tensor métrico. Fuente: elaboración propia.

3. Resultados

Con la finalidad de probar el buen comportamiento del algoritmo, se considera un dominio rectangular de dimensiones $\Omega = [0, 2.5] \times [-1, 0]$, con contorno $\partial\Omega = \Gamma_1 \cup \Gamma_2 \cup \Gamma_3 \cup \Gamma_4$, como se puede ver en la Figura 5. Se considerará velocidad nula $\mathbf{v} = \mathbf{0}$ en todas las fronteras, y en la frontera $\Gamma_D \equiv \Gamma_1 \cup \Gamma_2 \cup \Gamma_4$ se fijará la temperatura al valor de la temperatura ambiente $\theta = 0$ ($h = 0, Y_L = 0$), y en la frontera $\Gamma_R \equiv \Gamma_3$ se considerará una pérdida de calor por convección al ambiente. La condición inicial será $h = 0$ y $\mathbf{v} = \mathbf{0}$.

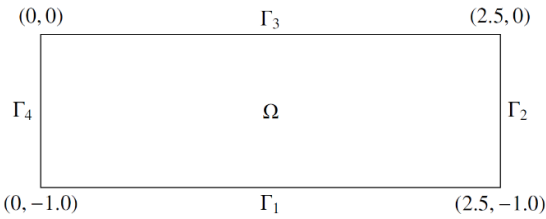


Figura 5. Esquema del dominio seleccionado. Fuente: elaboración propia.

La integración numérica tendrá lugar entre $0.0 < t \leq 5.0$. Se considerará una fuente de calor adimensional Q que se moverá hacia la derecha con velocidad constante. Para obtener más información del proceso físico, la fuente de calor sólo actuará hasta el instante $t = 1.0$, como puede verse en la siguiente expresión:

$$\begin{cases} Q = 25e^{-50(x_1 - (0.5 + 1.5t))^2 - 10(x_2 + 0.5)^2}(1 - e^{-5t}); & t \leq 1.0, \\ Q = 0; & 1.0 < t \leq 5.0, \end{cases} \quad (30)$$

Finalmente, para definir completamente el problema hay que especificar el conjunto de números adimensionales que intervienen en el modelo matemático, para ello se han seleccionado como referencia para su cálculo, las magnitudes con dimensiones que se utilizan en algunos trabajos de la

literatura [4] [15]. Lo único en lo que difiere es que se ha considerado un Gr más elevado para que el movimiento fluido tenga más influencia en el transporte de temperatura, y un Ste más reducido para que el efecto no lineal tenga más relevancia, mostrando así mejor la eficiencia de nuestro algoritmo. El conjunto de parámetros adimensionales a considerar se muestra en la Tabla 1.

Tabla 1. Parámetros físicos para el problema.

Números adimensionales	Símbolo	Valor
Stefan	Ste	0.5
Reynolds	Re	200
Grashof	Gr	10^6
Darcy	Da	10^{-4}
Peclet	Pe	40
Nusselt	Nu	10
Razón entre calores específicos	c_s/c_l	0.75
Razón entre conductividades térmicas	λ_s/λ_l	1.50

Fuente: elaboración propia.

Como parámetros de la simulación numérica se considerará un paso de tiempo $\Delta t = 0.01$ y una malla adaptativa con tamaño máximo de elemento $h_{\max} = 0.1$. Relativo a los detalles computacionales, todas las simulaciones se han llevado a cabo en un ordenador i7-8700 CPU con 16GB DDR3 RAM@1.3GHz, con sistema operativo Ubuntu 20.04.4 LTS, usando un código numérico escrito en lenguaje C.

En las Figuras 6 y 7 se puede ver una representación gráfica de la solución en algunos instantes de tiempo elegidos. Se representan en la parte inferior de las figuras las isolíneas que marcan la frontera entre la zona de sólido y líquido, junto con líneas de corriente azules que indican donde existe movimiento fluido. En el panel superior se representa un corte por la línea $x_2 = -0.5$ del dominio, para observar los perfiles de las variables termodinámicas del problema y también de la componente vertical del campo de velocidades v_{x_2} .

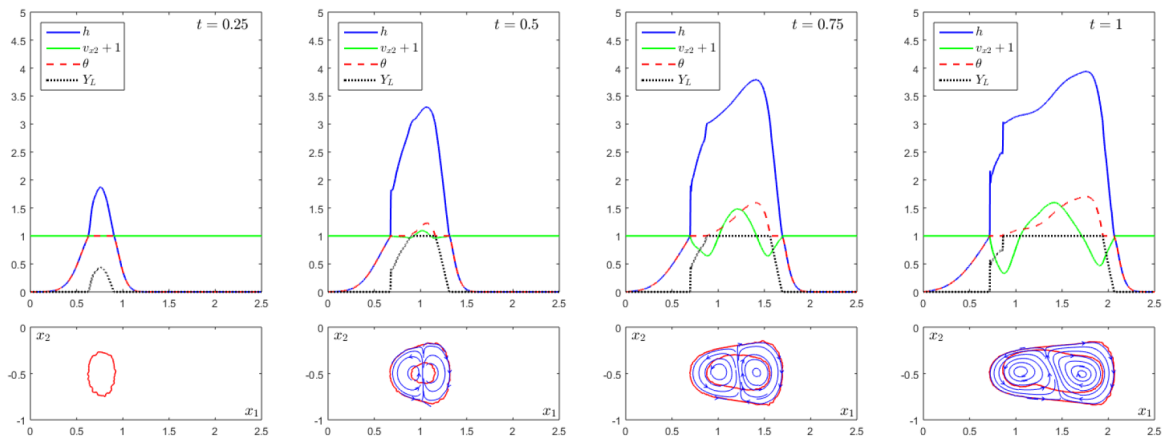


Figura 6. Soluciones obtenidas en los primeros instantes de tiempo $t \leq 1.0$, en los que está actuando la fuente de calor externa Q . Fuente: elaboración propia.

En concreto, en la Figura 6 se representa la solución en los primeros instantes de tiempo $t \leq 1.0$ en los que actúa la fuente de calor. Se puede ver que a partir de $t \sim 0.25$ el calor aportado ha conseguido calentar el sólido hasta alcanzar la temperatura de fusión $\theta = 1$, y empieza a aparecer la zona de mezcla de fases, llamada en inglés ‘mushy region’. La fuente en su movimiento sigue aportando calor y en $t \sim 0.5$ se observa la primera zona de líquido puro a temperaturas mayores de las de fusión. Es a partir de ese momento, cuando los términos de flotabilidad dejan de ser nulos y empieza el movimiento del fluido. Para tiempos mayores se observa una coexistencia de las 3 regiones (zona de sólido, zona de líquido, y zona de mezcla). En la zona delantera (a donde va llegando la fuente de calor) se produce la fusión del sólido, y presenta gradientes relativamente suaves en la variable entalpía h . Sin embargo, en la parte trasera (de donde se aleja la fuente de calor) se produce la resolidificación del líquido formado, y se van formando unos frentes en la variable entalpía h muy acusados entorno a las líneas que marcan la zona de mezcla y que hace que la zona donde coexistan las fases se vaya reduciendo.

Una vez apagada la fuente, empezará el fenómeno de enfriamiento y de homogeneización de la temperatura, efecto que se puede observar en detalle en la Figura 7. En pocos instantes de tiempo la zona donde existe la mezcla de fases empieza a reducirse drásticamente, fruto de la resolidificación del material. Se puede apreciar esta desaparición de la zona de mezcla muy bien en los laterales y en la zona superior donde el movimiento del fluido es más lento. Sin embargo, en la zona inferior es donde se mantiene la zona de mezcla hasta los últimos instantes de tiempo. Por otro lado, conforme el tiempo avanza, se observa la desaparición completa de la zona de mezcla, quedando solamente la fase sólida y la fase líquida, separada por una zona de discontinuidad, que va reduciendo su tamaño debido al calor que se va perdiendo.

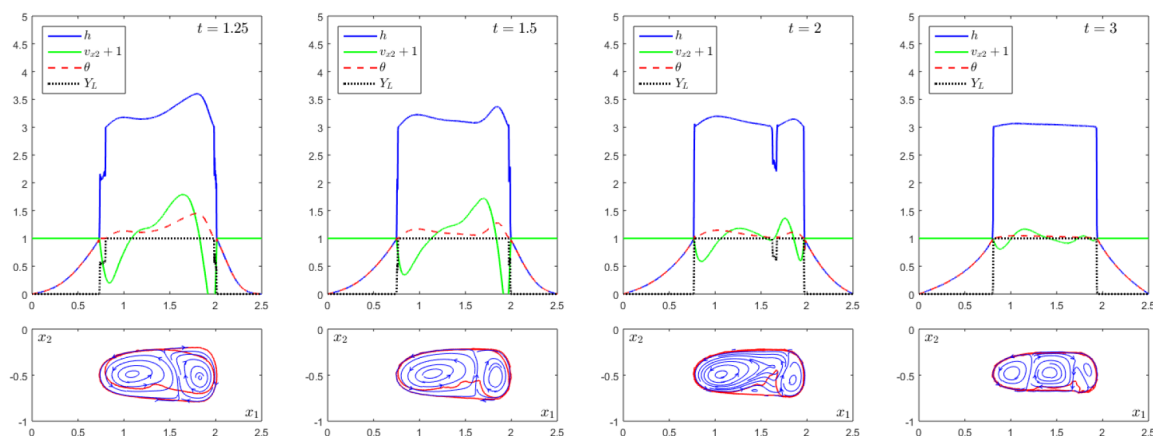


Figura 7. Soluciones obtenidas en los instantes finales de tiempo $t > 1.0$, en los que deja de actuar la fuente de calor externa Q . Fuente: elaboración propia.

Pero el calor solo fluye en los bordes de la interfase, porque en el interior, donde está el líquido a temperatura $\theta = 1$, no existe conducción del calor.

Para finalizar, en la Figura 8, se muestra la evolución en el tiempo del número de iteraciones internas que realiza el algoritmo de Newton para resolver la ecuación de la energía de naturaleza no lineal. Se puede observar el buen comportamiento del algoritmo de Newton utilizado, no llegando a superar las siete iteraciones en ningún momento del proceso. Por otro lado, se ha representado el número de elementos que configura el mallado adaptativo en función del tiempo. Se observa como alcanza el número de elementos un máximo cerca del instante donde se desactiva la fuente de calor, y posteriormente el número de elementos va descendiendo ligeramente.

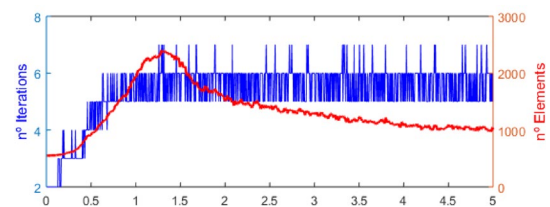


Figura 8. Evolución temporal del número de iteraciones internas del método de Newton y del número de elementos en el mallado adaptativo. Fuente: elaboración propia.

4. Conclusiones

El presente trabajo presenta un método numérico basado en la metodología de Lagrange-Galerkin para resolver un problema de soldadura. El modelo matemático se formula para definir correctamente la zona sólida, líquida y la zona de mezcla o blanda, que aparecen en el problema.

La ecuación de la energía se escribe de forma conservativa en la variable entalpía y para obtener el valor de la entalpía h se emplea el algoritmo de Newton. La ventaja de utilizar la variable de estado entalpía h es que el resto de variables termodinámicas pueden escribirse de forma monótona y univaluada en función de ella. Se ha comprobado las buenas propiedades del algoritmo de Newton en cuanto a la velocidad de convergencia, al hecho de no requerir parámetros adicionales, y al barato coste computacional para realizar el ensamblado matricial en cada iteración.

Para describir el campo de velocidad \mathbf{v} , se utilizan las leyes de conservación de masa y cantidad de movimiento, que son válidas en las tres zonas del material. Se considera fluido incompresible, salvo en los términos de flotabilidad dados por el modelo de Boussinesq. La zona de mezcla de fases se considera un medio poroso donde se tiene en cuenta la ley de Darcy. Para resolver numéricamente el problema de Stokes que se forma, se utiliza el algoritmo de gradiente conjugado tipo Uzawa.

Por último, se empleó para realizar las simulaciones numéricas el método de los elementos finitos con técnicas de adaptación de mallado anisótropo. Éste mejora sustancialmente los tiempos de cálculo y la precisión obtenida.

5. Referencias

- [1] V. Karkhin, *Engineering Materials Thermal Processes in Welding*, Springer, 2018.
- [2] J. C. Álvarez-Hostos, A. D. Bencomo, E. S. Puchi-Cabrera, V. D. Fachinotti, B. Tourn y J. C. Salazar-Bove, «Implementation of a standard stream-upwind stabilization scheme in the element-free Galerkin based solution of advection-dominated heat transfer problems during solidification in direct chill casting processes,» *Engineering Analysis with Boundary Elements*, pp. 170--181, 2019.
- [3] M. Shibahara y S. N. Atluri, «The meshless local Petrov-Galerkin method for the analysis of heat conduction due to a moving heat source, in welding,» *International Journal of Thermal Sciences*, pp. 984--992, 2011.
- [4] W. Piekarska y M. Kubiak, «Three-dimensional model for numerical analysis of thermal phenomena in laser-arc hybrid welding process,» *International Journal of Heat and Mass Transfer*, n° 2011, pp. 4966--4974, 2011.
- [5] A. Anca, A. Cardona, J. Risso y V. D. Fachinotti, «Finite element modeling of welding processes,» *Applied Mathematical Modelling*, pp. 688--707, 2011.
- [6] R. Bermejo, P. Galán Del Sastre y L. Saavedra, «A second order in time modified Lagrange-Galerkin finite element method for the incompressible Navier-Stokes equations,» *SIAM Journal on Numerical Analysis*, vol. 50, pp. 3084-3109, 2012.
- [7] R. Bermejo y L. Saavedra, «Finite elements, High Reynolds numbers, Lagrange-Galerkin, Local projection stabilization, Navier-Stokes,» *Computers and Mathematics with Applications*, vol. 72, pp. 820-845, 2016.
- [8] J. Carpio y J. L. Prieto, «An anisotropic, fully adaptive algorithm for the solution of convection-dominated equations with semi-Lagrangian schemes,» *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, vol. 273, pp. 77-99, 2014.
- [9] J. Carpio, J. L. Prieto y M. Vera, «A local anisotropic adaptive algorithm for the solution of low-Mach transient combustion problems,» *Journal of Computational Physics*, vol. 306, pp. 19-42, 2016.
- [10] J. H. Cho y S. J. Na, «Three-dimensional analysis of molten pool in GMA-laser hybrid welding,» *Welding Journal (Miami, Fla)*, pp. 35--43, 2009.
- [11] J. Zhou y H. L. Tsai, «Modeling of transport phenomena in hybrid laser-MIG keyhole welding,» *International Journal of Heat and Mass Transfer*, pp. 4353--4366, 2008.
- [12] R. Glowinski y O. Pironneau, «Numerische Mathematik On a Mixed Finite Element Approximation of the Stokes Problem (I) Convergence of the Approximate Solutions,» *Numer. Math*, vol. 33, pp. 397-424, 1979.
- [13] L. K. Waters, G. J. Fix y C. L. Cox, «Finite-element method, Glowinski-Pironneau method, Stokes problem,» *Computers and Mathematics with Applications*, vol. 48, pp. 1191-1211, 2004.
- [14] Y. Shu, J. Li y C. Zhang, «A local and parallel Uzawa finite element method for the generalized Navier-Stokes equations,» *Applied Mathematics and Computation*, vol. 387, 2020.
- [15] W. Piekarska y M. Kubiak, «Modeling of thermal phenomena in single laser beam and laser-arc hybrid welding processes using projection method,» *Applied Mathematical Modelling*, vol. 37, pp. 2051-2062, 2013.