

## **6. DIFERENCIAS FINITAS 1D**

Existen dos métodos para generar un sistema de ecuaciones de diferencias finitas para problemas de transferencia de calor:

- Comenzar con las ecuaciones diferenciales parciales del calor y expresarlas en forma de diferencias finitas.
- Realizar un balance de energía para regiones específicas de interés.

En este proyecto se ha utilizado el primero de los métodos que a continuación se va a detallar.

### **6.1. APROXIMACIÓN POR DIFERENCIAS FINITAS PARA DERIVADAS**

La función  $T(x)$  puede ser aproximada por una serie de Taylor en  $x$  como:

$$T(x + \Delta x) = T(x) + \Delta x \cdot \frac{dT(x)}{dx} + \frac{\Delta x^2}{2} \cdot \frac{d^2T(x)}{dx^2} + \frac{\Delta x^3}{6} \cdot \frac{d^3T(x)}{dx^3} + \dots$$

y

$$T(x - \Delta x) = T(x) - \Delta x \cdot \frac{dT(x)}{dx} + \frac{\Delta x^2}{2} \cdot \frac{d^2T(x)}{dx^2} - \frac{\Delta x^3}{6} \cdot \frac{d^3T(x)}{dx^3} + \dots$$

Truncando la primera ecuación después de los dos primeros términos y despejando la primera derivada de dicha ecuación obtenemos la aproximación en diferencias finitas en forma implícita:

$$\frac{dT(x)}{dx} = \frac{T(x + \Delta x) - T(x)}{\Delta x} + \text{error}(\Delta x)$$

El error debido al truncamiento de la serie de Taylor es del orden de  $\Delta x$ .

Truncando la segunda ecuación después de los dos primeros términos y despejando la primera derivada de dicha ecuación obtenemos la aproximación en diferencias finitas en forma explícita:

$$\frac{dT(x)}{dx} = \frac{T(x) - T(x - \Delta x)}{\Delta x} + \text{error}(\Delta x)$$

Si truncando ambas ecuaciones en el tercer término, le restamos la segunda de las ecuaciones a la primera y despejamos la primera derivada de la función, obtenemos la aproximación de la primera derivada en forma centrada:

$$\frac{dT(x)}{dx} = \frac{T(x + \Delta x) - T(x - \Delta x)}{2 \cdot \Delta x} + \text{error}(\Delta x^2)$$

Para obtener la aproximación en diferencias finitas de la segunda derivada truncamos las ecuaciones en el tercer término y las sumamos, para posteriormente despejar la segunda derivada, obteniendo la siguiente relación, que es también una relación de diferencias centrada:

$$\frac{d^2T(x)}{dx^2} = \frac{T(x + \Delta x) + T(x - \Delta x) - 2 \cdot T(x)}{\Delta x^2} + \text{error}(\Delta x^2)$$

Tanto a la fase en estado sólido como a la fase en estado gaseoso se les puede aplicar la ecuación de conducción de calor ya que por simplificación se suele asumir que no existe convección en la fase líquida. Utilizaremos el subíndice  $a$  para referirnos tanto al estado sólido, líquido o al cambio de fase, siendo sus propiedades en cada caso distintas y que serán definidas en el próximo apartado. De manera que la ecuación de conducción de calor que se utiliza es:

$$\frac{\partial}{\partial x} \left( K_a \cdot \frac{\partial T}{\partial x} \right) = \rho_a \cdot C_a \cdot \frac{\partial T}{\partial t}$$

Aplicándole a esta ecuación el método de diferencias finitas explícitas obtenemos:

$$K_a \cdot \left[ \frac{T(x + \Delta x, t) + T(x - \Delta x, t) - 2 \cdot T(x, t)}{\Delta x^2} \right] = C p_a \cdot \rho_a \cdot \left[ \frac{T(x, t + \Delta t) - T(x, t)}{\Delta t} \right]$$

Despejando el término de la temperatura en el tiempo  $(t+\Delta t)$  obtenemos la ecuación que se utilizará para el cálculo del campo de temperaturas.

$$T(x, t + \Delta t) = \underbrace{\frac{K_a}{C p_a \cdot \rho_a} \cdot \frac{\Delta t}{\Delta x^2}}_M \cdot [T(x + \Delta x, t) + T(x - \Delta x, t) - 2 \cdot T(x, t)] + T(x, t)$$

$$M = \frac{\alpha_a \cdot \Delta t}{\Delta x^2}$$

$$\alpha_a = \frac{K_a}{\rho_a \cdot C p_a}$$

## 6.2. ESTUDIO DE LAS HIPÓTESIS DE SIMULACIÓN

Debido a que es necesario establecer un rango en el cual ocurre el cambio de fase, la primera variable en estudio es justamente este rango.

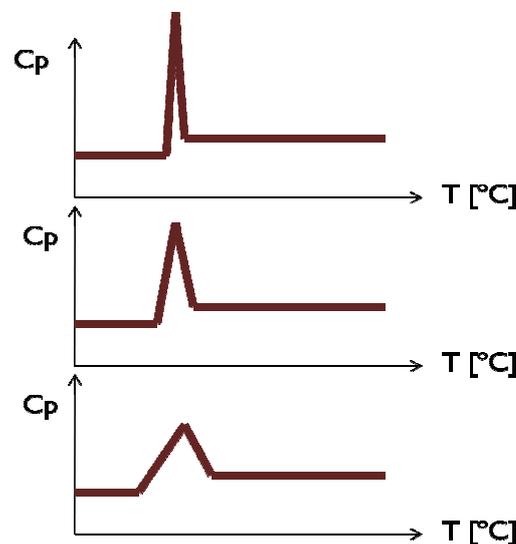
El segundo criterio a estudiar es el nivel de mallado necesario, dado que aunque es bien conocido que cuanto más fina sea la malla, menor será el error, consideraciones relacionadas con la acumulación de errores y el tiempo de cálculo y los recursos computacionales, hacen recomendable que el afinamiento de la malla tenga un límite.

Finalmente la tercera variable estudiada es el paso de tiempo, siendo válidas las mismas consideraciones realizadas para el nivel de mallado.

### 6.2.1. Intervalo de temperaturas en el que ocurre el cambio de fase de fase

La siguiente figura muestra a nivel cualitativo la forma en la que se ha realizado la selección de rango de temperaturas en la que ocurre el cambio de fase.

En la figura resulta evidente el efecto de aumentar el rango de temperaturas. Si se selecciona un rango estrecho de temperaturas para el cambio de fase, es necesario considerar una capacidad térmica muy grande. A medida que dicho rango se amplía, la capacidad térmica equivalente se reduce.



**Figura 38. Evolución de la capacidad térmica para distintos rangos de temperatura de cambio de fase**

El problema de seleccionar un rango de temperaturas muy estrecho, es que dificulta la convergencia del método numérico y aumenta el error que éste comete. Por otro lado, un rango demasiado amplio, se aleja de la situación real y finalmente el resultado puede guardar poca relación con el caso que se está estudiando.

A continuación se presentan los resultados obtenidos para diferentes rangos de temperatura en los cuales se ha asumido que ocurre el cambio de fase y se compara con la solución analítica exacta.

### 6.2.2. Nivel de mallado y paso de tiempo

Las dos últimas variables en estudio es el nivel de mallado y los pasos de tiempo. La siguiente figura esquematiza lo que implica variar el paso de tiempo de cálculo:

La ecuación del calor discretizada en diferencias finitas mediante el método explícito solo converge si (Carnahan 1969)

$$0 < M \leq 1/2$$

Esta restricción significa si se quiere que el error de truncar la serie de Taylor sea reducido debe reducirse  $\Delta x$ , por lo que al deber cumplirse la restricción el paso de tiempo también debe reducirse:

$$\Delta t \leq \frac{\Delta x^2}{2 \cdot \alpha}$$

Esta puede ser una restricción severa en términos de tiempo computacional, ya que requiere muchas iteraciones para alcanzar un tiempo determinado.

Sin embargo, este método presenta una gran ventaja que, como su propio nombre indica, las ecuaciones de cada nodo se resuelven una a una y por estricto orden.

Las limitaciones del método explícito se resuelven considerando un diferente esquema de paso de tiempo, es decir, utilizando el método implícito o el centrado. Además, el método centrado tiene la ventaja adicional de tener un menor error de truncamiento que el método explícito y el implícito. Sin embargo, ambos métodos requieren la resolución de un sistema de ecuaciones algebraicas simultáneo.

A partir de simulaciones y análisis, se encontró que se puede definir un número adimensional que permite definir un paso de tiempo adecuado para un problema particular.

$$N = \alpha \cdot St \cdot \frac{\Delta t}{\Delta x^2}$$

En las pruebas realizadas se ha encontrado que la convergencia y el grado de error son buenos si  $N \leq 1$ .

Cuanto menores sean  $\Delta x$  y  $\Delta t$  el resultado será más aproximado a la solución exacta.

### 6.3. CAMBIO DE FASE EN DIFERENCIAS FINITAS

El área encerrada por la curva del calor específico debe ser igual que el efecto del calor latente en el incremento de temperatura  $\Delta T$ , pero Bonacina et al.(1974) notó que la forma que asumía la curva no parecía tener importancia para el cálculo del campo de temperaturas. Bonacina et al. (1973) sugirió que el efecto del calor latente puede asumirse que ocurre en un rango de temperaturas  $T_f \pm \Delta T$ . Entonces el calor específico aparente puede escribirse como:

$$2 \cdot C_a \cdot \Delta T = \int_{T_f - \Delta T}^{T_f} C_i \cdot dT + L + \int_{T_f}^{T_f + \Delta T} C_s \cdot dT$$

Si los calores específicos son constantes con la temperatura, el calor específico aparente es:

$$C_a = \begin{cases} C_i & \text{si } T < T_f - \Delta T \\ \frac{C_i + C_s}{2} + \frac{L}{2 \cdot \Delta T} & \text{si } T_f - \Delta T < T < T_f + \Delta T \\ C_s & \text{si } T > T_f + \Delta T \end{cases}$$

Bonacina et al. (1973) también propuso que la conductividad térmica podía ser aproximada como:

$$K_a = \begin{cases} K_i & \text{si } T < T_f - \Delta T \\ K_i + \frac{K_s - K_i}{2 \cdot \Delta T} \cdot [T - (T_f - \Delta T)] & \text{si } T_f - \Delta T < T < T_f + \Delta T \\ K_s & \text{si } T > T_f + \Delta T \end{cases}$$

#### 6.4. CONDICIONES DE TEMPERATURA IMPUESTA

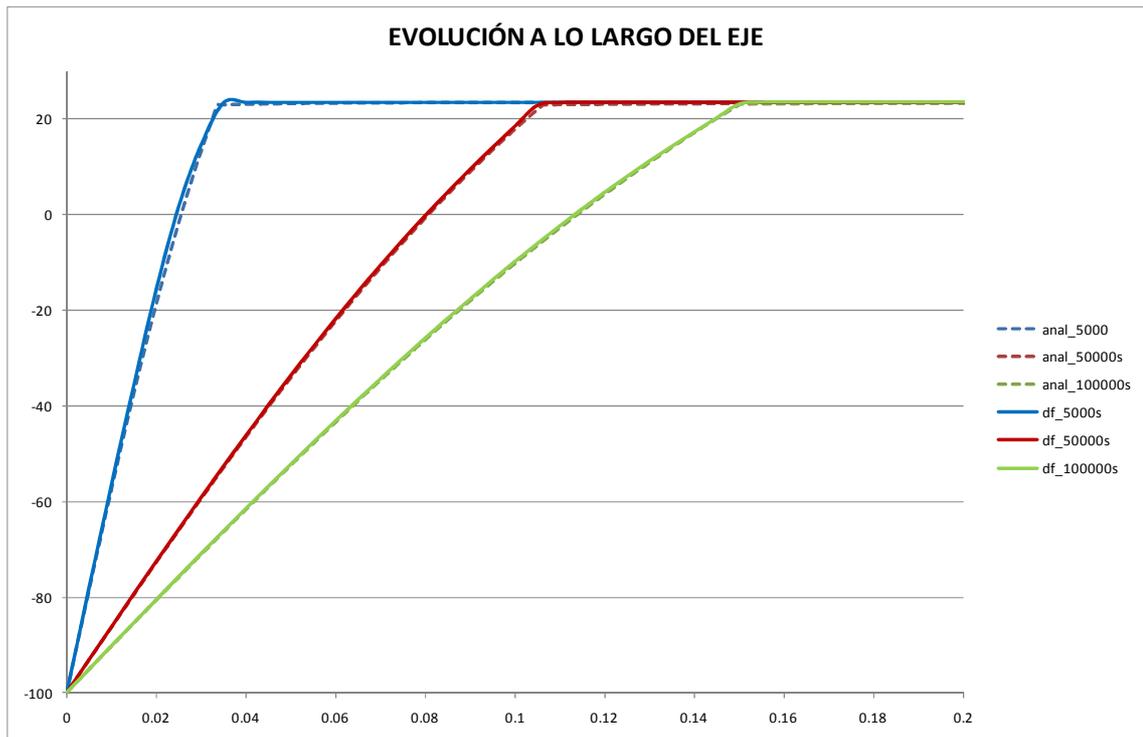
Para comprobar la validez de las soluciones numéricas propuestas las vamos a comparar con las soluciones analíticas. También comprobaremos cómo varían las respuestas variando el intervalo de temperatura en que ocurre el cambio de fase en la solución numérica modelada. Se parte de las propiedades del material cambio de fase con 23°C de temperatura de fusión PLUSICE<sup>®</sup>, sacadas del catálogo de la página web de dicha empresa, siendo sus propiedades las siguientes:

- Densidad: 785 Kg/m<sup>3</sup>
- Calor latente: 170 KJ/Kg
- Conductividad térmica: 0.18 W/(m·K)
- Calor específico: 2.22 KJ/(Kg·K)
- Espesor del bloque: 0.5 m
- Tiempo final: 100000 s
- Temperatura superficial constante a lo largo del tiempo: -100°C
- Intervalo en que se produce el cambio de fase:  $\Delta T = 0.02^\circ\text{C}$
- Incremento de tiempo:  $\Delta t = 80.71$  s
- Incremento de espacio:  $\Delta x = 0.005$  m
- Número de nodos espaciales: N=100
- Número de nodos temporales: M=1239

La temperatura inicial del bloque para la solución numérica será de 23.01°C, pero para la solución analítica será de 23°C. Esto se debe a que si la temperatura inicial de la solución numérica coincidiera con 23°C, en el cambio de fase no se utilizaría todo el calor disponible en el material.

El número de nodos temporales se calcula de modo que el número de Fourier sea 3 para de esta forma asegurar la convergencia.

Se van a calcular varios tipos de errores, el error máximo relativo en temperaturas, el error medio temporal máximo relativo en temperaturas, el error medio espacial máximo relativo en temperaturas, el error medio total relativo en temperaturas y el error máximo relativo en calor transferido.



**Figura 39. Evolución de la temperatura a lo largo del eje para distintos instantes de tiempo para condición de temperatura impuesta**

Se calcula el error relativo en temperatura para cada instante de tiempo y para cada nodo, de manera que tenemos  $100 \times 1239 = 123900$  errores relativos:

$$\text{error}_T(t, x) = \text{abs} \frac{(T_{\text{analítico}} - T_{\text{dif.finitas}})}{T_{\text{analítico}}}$$

De todos estos errores el valor máximo es de 5.73%.

Calculamos a continuación la media de los errores en cada instante de tiempo para todos los nodos, de manera que obtendremos 1239 errores relativos medios en temperatura para cada instante de tiempo:

$$\overline{\text{error}_T}(t) = \frac{\sum_x \text{error}_T(t, x)}{N}$$

De estos errores el valor máximo es de 0.073%.

Calculamos a continuación la media de los errores en cada nodo para todos los instantes de tiempo, de manera que obtendremos 100 errores relativos medios en temperatura para cada nodo:

$$\overline{\text{error}_T(x)} = \frac{\sum_t \text{error}_T(t, x)}{M}$$

De estos errores el valor máximo es de 0.16%.

Calculamos a continuación la media de todos los errores para todos los nodos y para todos los instantes de tiempo, de manera que obtendremos un error relativo medio en temperatura:

$$\overline{\overline{\text{error}_T}} = \frac{\sum_t \sum_x \text{error}_T(t, x)}{M \cdot N}$$

El error relativo medio es de 0.03%

Esta diferencia en la magnitud de los errores en temperatura se debe a que se producen errores mayores en los primeros instantes de tiempo y en los primeros nodos espaciales, sin embargo, a medida que se avanza en el tiempo y en los nodos los errores se reducen drásticamente.

Para calcular el error relativo del calor transferido, primero calcularemos el calor transferido en cada instante de tiempo tomando la diferencia de temperaturas entre los dos primeros nodos más cercanos a la superficie para a continuación sumar todos estos calores obteniendo el calor transferido total.

$$q(t) = -K \cdot \frac{\Delta T(t)}{\Delta x} \cdot \Delta t = -K \cdot \frac{T_2(t) - T_1(t)}{\Delta x} \cdot \Delta t$$

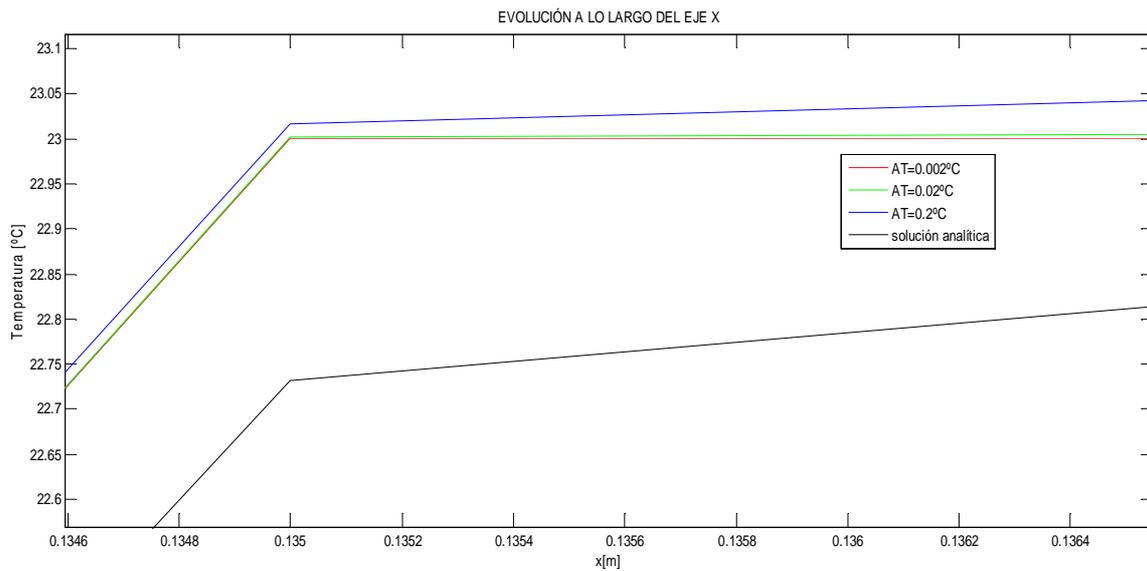
$$q = \sum_t q(t)$$

El error relativo en calor transferido queda por tanto:

$$\text{error}_q = \frac{\sum_t q_{\text{analítico}}(t) - \sum_t q_{\text{dif.finitas}}(t)}{\sum_t q_{\text{analítico}}(t)} = 0.78\%$$

Con las mismas especificaciones y propiedades vamos a ver cómo influye el intervalo de temperaturas en el que se efectúa el cambio de fase. Vamos a estudiar 3 casos:

- $\Delta T=0.2$  K
- $\Delta T=0.02$  K
- $\Delta T=0.002$  K



**Figura 40. Evolución de la temperatura a lo largo del eje x para distintos  $\Delta T$**

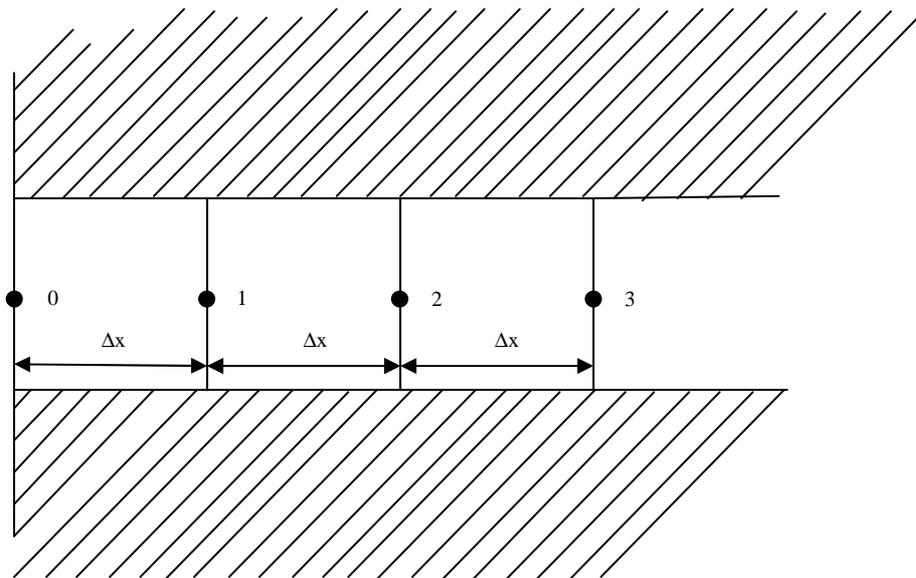
Aunque la temperatura inicial en cada caso es de 23.001°C, 23.01°C y 23,1°C se observa claramente como al aumentar  $\Delta T$  la curva de la solución numérica se aleja de la solución analítica, cuya temperatura inicial se ha cogido de 23°C.

### 6.5. CONDICIONES CONVECTIVAS

Para problemas transitorios 1-D con propiedades constantes  $\rho$ ,  $C_p$  y  $K$  sujetos a condiciones de contorno convectivas, para un pequeño intervalo de tiempo  $\Delta t$  el método del balance de energía da la siguiente ecuación para el nodo del contorno (D.R.Croft y D.G.Lilley):

$$\rho \cdot C_p \cdot V_0 \cdot \frac{\Delta T_0}{\Delta t} = \frac{K}{\Delta x} \cdot (T_1 - T_0) + h \cdot (T_\infty - T_0)$$

donde  $V_0 = \Delta x/2$ .



**Figura 41. Esquema de los nodos más superficiales de material**

Expresando la ecuación anterior de forma explícita obtenemos:

$$T_0(t + \Delta t) = 2 \cdot Fo \cdot \left[ T_1(t) + Bi \cdot T_\infty + T_0(t) \cdot \left( \frac{1}{2 \cdot Fo} - 1 - Bi \right) \right]$$

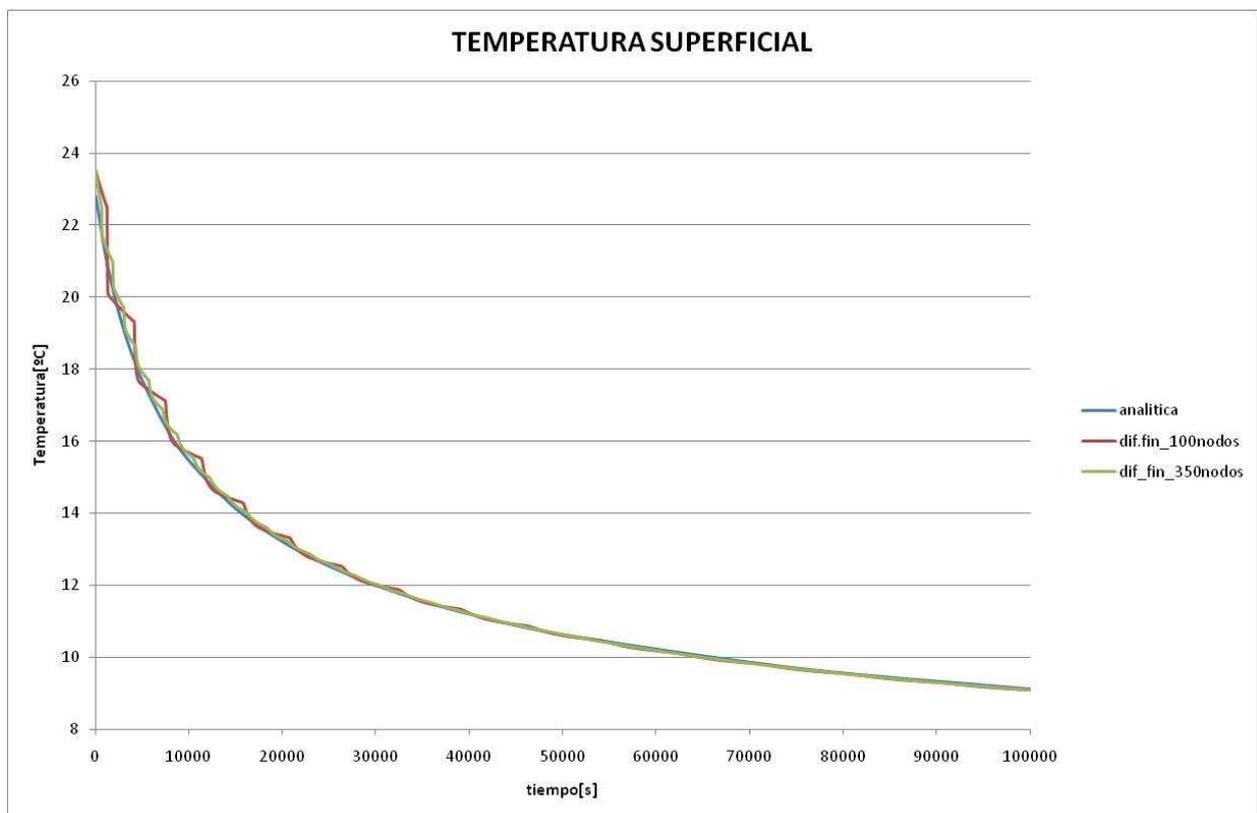
Donde

$$Fo = \frac{K_a}{\rho \cdot C_p \cdot \Delta x^2} \qquad Bi = \frac{h \cdot \Delta x}{K}$$

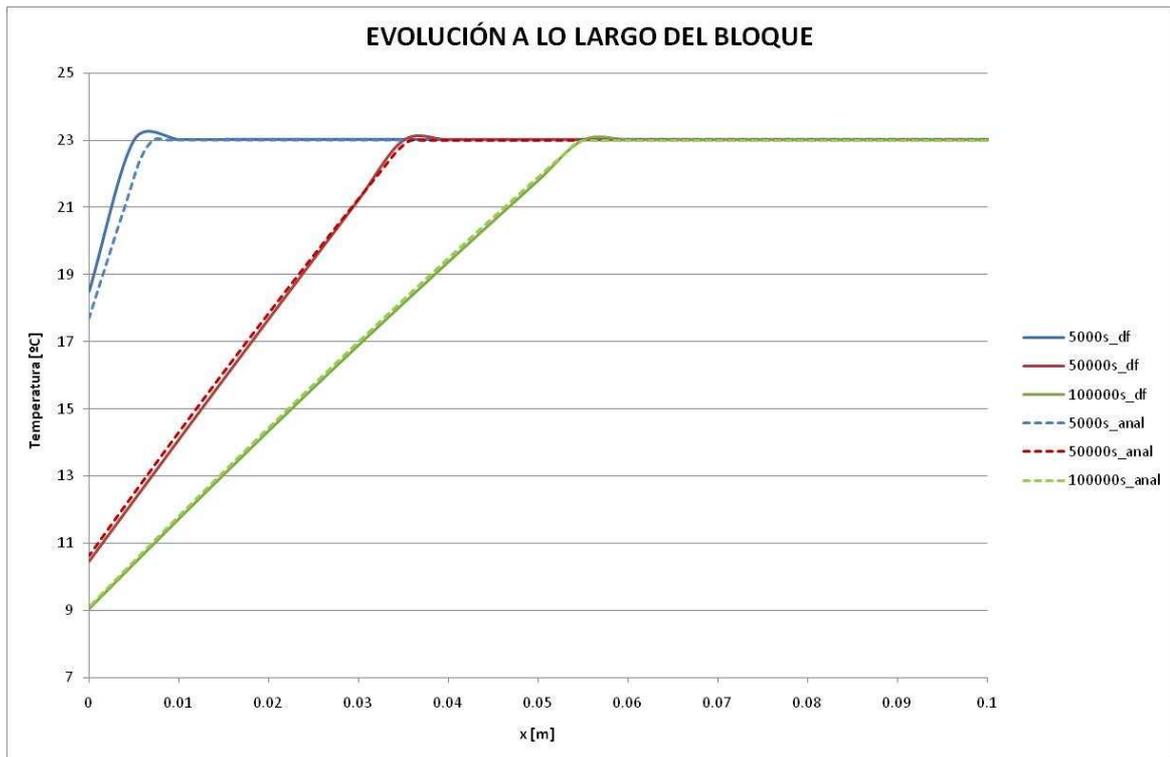
La comprobación de la validez de las soluciones numéricas propuestas, se hace mediante la comparación con las soluciones analíticas con condiciones convectivas; de forma análoga a lo realizado con las soluciones en condiciones de temperatura impuesta.

El material y las condiciones seleccionadas para la simulación son las mismas que para el caso de condiciones de temperatura impuesta, únicamente que la temperatura superficial no se sabe a priori, siendo la temperatura conocida la ambiental y teniendo que añadir el valor del coeficiente de película:

- Temperatura ambiental constante a lo largo del tiempo: 278.15 K
- Coeficiente de película:  $h=12 \text{ W}/(\text{m}^2 \cdot \text{K})$



**Figura 42. Evolución de la temperatura superficial para condiciones convectivas para 300 y 350 nodos**



**Figura 43. Evolución de la temperatura a lo largo del eje con condición convectiva para distintos instantes de tiempo**

La evolución de la temperatura a lo largo del bloque se ha simulado con únicamente 100 nodos, que aunque se ha visto que se comete mayor error en la temperatura superficial, el error cometido a lo largo del bloque es bastante pequeño. Vemos como la exactitud se incrementa a medida que se avanza en el tiempo. Aunque el bloque mide medio metro, para los tiempos simulados, el resto del bloque se queda en la temperatura inicial, es decir en la temperatura de cambio de fase.

Analizando los resultados obtenidos por el programa diseñado, se observa como la evolución de la temperatura superficial con el tiempo coincide con la solución analítica. Al haberse obtenido la temperatura superficial de un balance de energía discretizando el bloque, a medida que aumentamos el número de nodos se observa como la solución obtenida por diferencias finitas se acerca más a la analítica y es más continua.

Vamos a calcular los mismos tipos de errores que se calcularon en la solución de condiciones de temperatura impuesta: el error máximo relativo en temperaturas, el error medio temporal máximo relativo en temperaturas, el error medio espacial

máximo relativo en temperaturas, el error medio total relativo en temperaturas y el error máximo relativo en calor transferido.

El error relativo en temperatura para cada instante de tiempo y para cada nodo es:

$$\text{error}_T(t, x) = \text{abs} \frac{(T_{\text{analítico}} - T_{\text{dif.finitas}})}{T_{\text{analítico}}}$$

El valor máximo es de 0.82%.

El error relativo medio en temperatura para cada instante de tiempo es:

$$\overline{\text{error}}_T(t) = \frac{\sum_x \text{error}_T(t, x)}{N}$$

El valor máximo es de 0.014%.

El error relativo medio en temperatura para cada nodo es:

$$\overline{\text{error}}_T(x) = \frac{\sum_t \text{error}_T(t, x)}{M}$$

El valor máximo es de 0.063%.

El error relativo medio en temperatura es:

$$\overline{\overline{\text{error}}}_T = \frac{\sum_t \sum_x \text{error}_T(t, x)}{M \cdot N}$$

El error relativo medio es de 0.008%

El error relativo en calor transferido queda es:

$$\text{error}_q = \frac{\sum_t q_{\text{analítico}}(t) - \sum_t q_{\text{dif.finitas}}(t)}{\sum_t q_{\text{analítico}}(t)} = 0.26\%$$

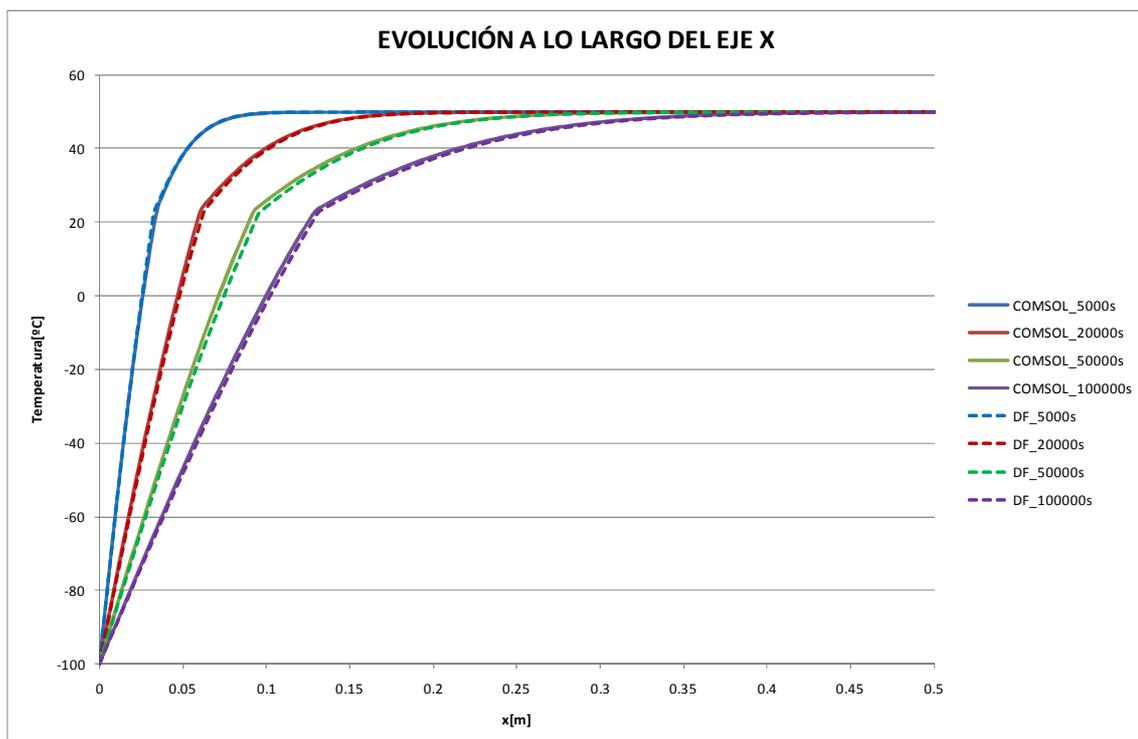
Todos los errores son menores del 1%, por lo que es aceptable considerar que COMSOL es un buen método para calibrar el método de diferencias finitas para condiciones convectivas.

## 6.6. VALIDACIÓN CON COMSOL EN CONDICIONES DISTINTAS A LAS ANALÍTICAS

A continuación utilizando COMSOL como programa numérico de referencia vamos a comparar una solución numérica con nuestro modelo propio con temperatura impuesta y una con condición convectiva con condiciones distintas a las analíticas. Se realizarán las simulaciones con el mismo material A\_23.

### 6.6.1. Condición de temperatura impuesta

La temperatura superficial impuesta será de  $-100^{\circ}\text{C}$ , mientras que la temperatura inicial será de  $50^{\circ}\text{C}$ . El resto de especificaciones y condiciones serán las mismas que en los apartados anteriores.



*Figura 44. Evolución a lo largo del eje para condiciones de temperatura impuesta distintas a las analíticas para distintos instantes de tiempo*

Se calculará el máximo error en los cuatro tiempos simulados. El error en cada uno de los instantes de tiempo se va a calcular cómo:

$$\text{error} = \text{abs} \frac{(T_{\text{COMSOL}} - T_{\text{DF}})}{T_{\text{COMSOL}}}$$

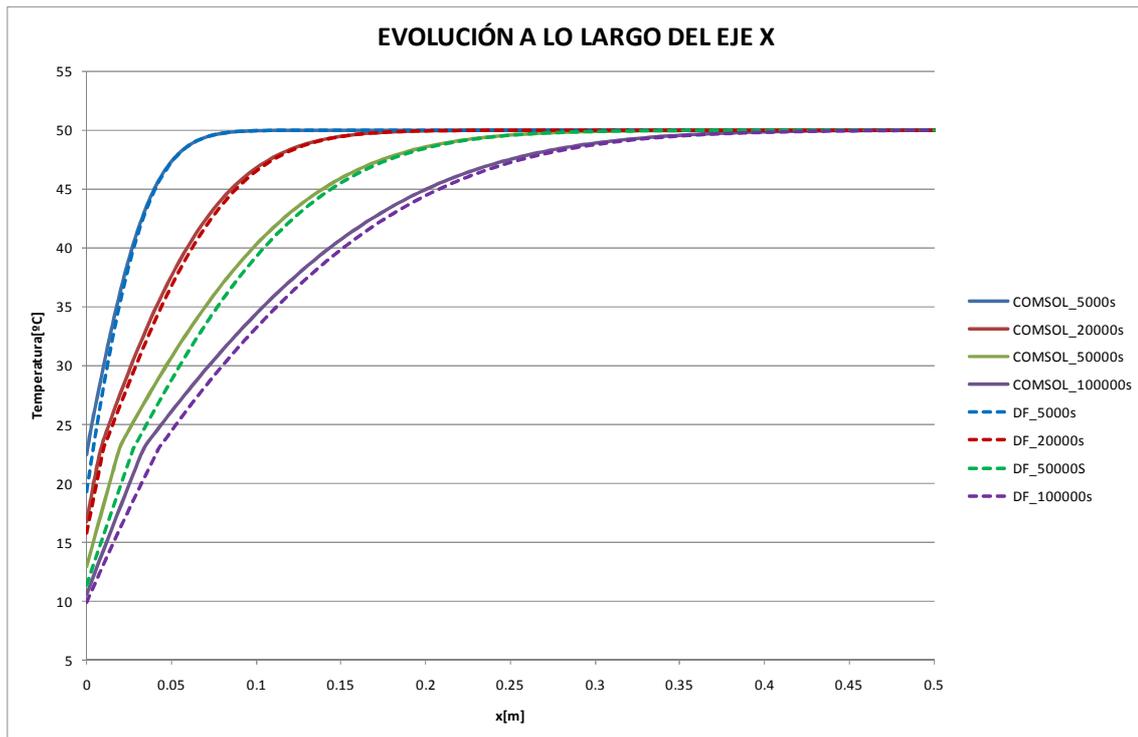
El error máximo en cada instante de tiempo es:

- $t=5000\text{s} \rightarrow 1.3\%$
- $t=20000\text{s} \rightarrow 1.11\%$
- $t=50000\text{s} \rightarrow 1.35\%$
- $t=100000\text{s} \rightarrow 0.76\%$

El error es un poco mayor que la comparación con las soluciones analíticas, sin embargo, sigue siendo muy bajo, de modo que la evolución seguida por el método de diferencias finitas tiene una gran semejanza con los resultados obtenidos con COMSOL.

### 6.6.2. Condición convectiva

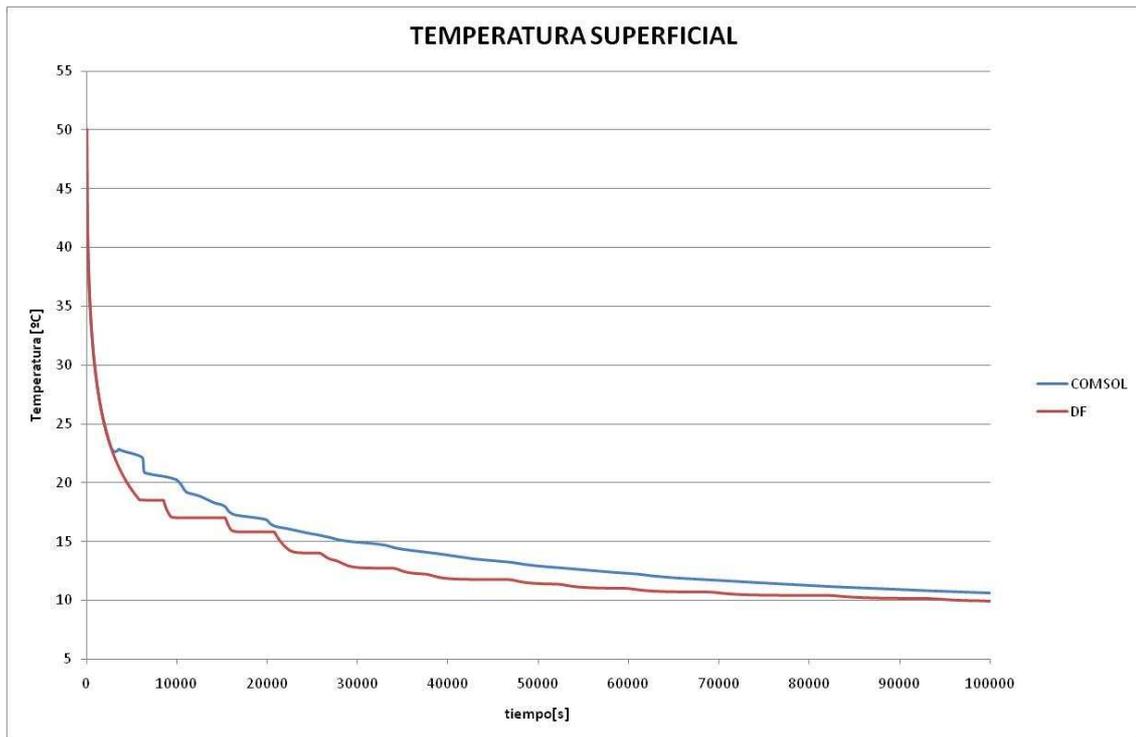
La temperatura ambiente será de  $5^{\circ}\text{C}$ , mientras que la temperatura inicial será de  $50^{\circ}\text{C}$ . El resto de especificaciones y condiciones serán las mismas que en los apartados anteriores.



**Figura 45. Evolución a lo largo del eje para condiciones de temperatura impuesta distintas a las analíticas para distintos instantes de tiempo**

Al observar la evolución en varios instantes de tiempo (5000s, 20000s, 50000s, 100000s) se ve como la temperatura superficial influye de gran manera en dicha evolución. Se aprecia cómo en la temperatura del cambio de fase, en el programa COMSOL existe una gran diferencia de pendientes, que el programa en diferencias finitas no es tan pronunciado. Esto se debe a que en COMSOL el intervalo de temperaturas en que se produce el cambio de fase es  $1^{\circ}\text{C}$ , mientras que en programa de diferencias finitas es de  $0.02^{\circ}\text{C}$ .

En la siguiente figura se representa la evolución de la temperatura superficial con respecto al tiempo. Se destaca cómo las curvas se distancian a partir de que se alcanza la temperatura de cambio de fase, a partir de la cual la evolución es fluctuante hasta que se consigue una evolución más suave donde ambas curvas tienden a volver a acercarse.



**Figura 46. Evolución de la temperatura superficial a lo largo del tiempo para condiciones convectivas distintas a las analíticas**

Se calculará el máximo error en los cuatro tiempos simulados. El error en cada uno de los instantes de tiempo se va a calcular cómo:

$$\text{error} = \text{abs} \frac{(T_{\text{COMSOL}} - T_{\text{DF}})}{T_{\text{COMSOL}}}$$

El error máximo en cada instante de tiempo es:

- $t=5000s \rightarrow 1.07\%$
- $t=20000s \rightarrow 0.43\%$
- $t=50000s \rightarrow 1.14\%$
- $t=100000s \rightarrow 0.87\%$

El máximo error en la evolución de la temperatura superficial a lo largo del tiempo es 1.3%. Es lógico que el error sea mayor en la superficie, ya que como la solución tiende a la temperatura inicial, el error tiende a disminuir.