

Evaluación de esquemas de diferencia finita para la construcción de las cartas de Gurney-Lurie

M.A. Núñez-Esquer*, J.A. Garcilaso-Véjar y A. Ruiz-Manríquez
*Departamento de Ingeniería Química y Metalurgia, Universidad de Sonora,
Hermosillo, Sonora, México,
e-mail: manunez@iq.uson.mx

Received 8 de septiembre de 2004; accepted 7 de diciembre de 2004

Las cartas de Gurney-Lurie son gráficas de la solución del modelo matemático de conducción de calor en estado no-estacionario para geometrías prototipo como placa plana, cilindro de longitud infinita y esfera. En el presente trabajo se reporta un ejercicio de apoyo didáctico consistente en la evaluación de tres esquemas de diferencia finita para la solución del modelo matemático de conducción de calor y la construcción numérica de las cartas de Gurney-Lurie, utilizando un conjunto específico de parámetros numéricos. Se considera que este trabajo puede utilizarse en cursos avanzados de programas de ciencias e ingeniería que traten sobre la solución numérica de ecuaciones diferenciales parciales o transferencia de calor.

Descriptores: Cartas de Gurney-Lurie; diferencias finitas; solución numérica de EDP's.

Gurney-Lurie Charts are plots of the mathematical model solution for non-steady state heat conduction in prototype geometries like flat plate, infinite length cylinder and sphere. In this work, we report a didactic exercise which consists in the evaluation of three finite difference schemes for the solution of the heat conduction mathematical model and the numerical construction of the Gurney-Lurie Charts, using a particular set of numerical parameters. This work can be applied in advanced courses of science and engineering programs related with the numerical solution of partial differential equations or heat transfer.

Keywords: Gurney-Lurie Charts; finite differences; numerical solution of PDE's.

PACS: 02.70.Bf; 44.05.+e; 01.50.Ht

1. Introducción

Una de las herramientas numéricas de mayor aplicación en la solución de ecuaciones diferenciales parciales que surgen del modelamiento de fenómenos físicos, químicos o biológicos lo constituyen las técnicas de diferencia finita. Sus ventajas se ponen de manifiesto sobre todo en casos donde no puede obtenerse la solución deseada empleando métodos analíticos, ya sea que se trate de una ecuación de tipo no lineal, se pretenda modelar geometrías complejas o las condiciones límite sean matemáticamente complicadas. Este tipo de metodología, además, compete en forma satisfactoria con el método numérico de elemento finito y en ocasiones lo supera en aspectos relativos a eficiencia de cómputo y facilidad de programación. Debido a ello es un tema obligado en todo curso que trate sobre la solución numérica de ecuaciones diferenciales parciales en programas de posgrado en ciencias e ingeniería.

El enfoque tradicional de enseñanza de este tipo de metodologías consiste en presentar en sesiones de clase la teoría básica de aproximaciones de diferencia finita, los conceptos de convergencia, consistencia y estabilidad, y aplicar estas técnicas en la solución de modelos matemáticos de tipo parabólico, elíptico e hiperbólico a través de tareas semanales asignadas al estudiante. En nuestra experiencia, además de este planteamiento básico, hemos obtenido resultados positivos al asignar al grupo de estudiantes un proyecto numérico semestral que involucre la solución de un problema de mayor complejidad que ilustre al alumno la aplicación de estas técnicas en ejercicios que le permitan una mejor comprensión de los temas discutidos en clase.

Uno de estos proyectos semestrales diseñado por los autores y asignado recientemente en nuestro curso a nivel posgrado "Métodos Numéricos en Ciencias e Ingeniería", consistió en la evaluación numérica de tres esquemas clásicos de diferencia finita para la construcción de las llamadas cartas de Gurney-Lurie de transferencia de calor por conducción para estado no-estacionario.

El trabajo a desarrollar durante la elaboración de este proyecto resulta amplio e integral, en el sentido de que requiere aplicar conceptos que van desde la discretización de la ecuación diferencial parcial y condiciones frontera/inicial que gobiernan el proceso de transferencia de calor para cada geometría, el análisis de estabilidad para determinar los tamaños de malla que sea conveniente utilizar, el uso de lenguajes de programación (en este caso FORTRAN 77) para obtener las soluciones analítica y numérica del problema, el cálculo de errores numéricos, hasta la aplicación de software para la generación de las gráficas correspondientes (Microsoft ExcelTM fue el disponible).

En esta presentación nuestro objetivo es describir el ejercicio asignado a los estudiantes, el procedimiento utilizado para evaluar tres esquemas clásicos de diferencias finitas para la construcción de las cartas de Gurney-Lurie y algunos resultados típicos obtenidos durante la implementación de este experimento numérico para un conjunto dado de parámetros utilizados.

2. Planteamiento del proyecto numérico

Las cartas de Gurney-Lurie [1,2] representan gráficamente la solución del modelo matemático de difusión de calor en sólido

dos de geometría modelo tales como placa plana infinita de espesor uniforme, cilindro de longitud infinita y esfera. Se utilizan de forma generalizada en ciencias e ingeniería para analizar situaciones donde la transferencia unidimensional de calor por conducción es dominante o donde esta aproximación es válida.

El proyecto numérico asignado a los estudiantes consistió en la evaluación de tres esquemas clásicos de diferencia finita [3] de uso común en la solución de ecuaciones diferenciales parciales de tipo parabólico (explícito, completamente implícito y Crank-Nicolson) y seleccionar el esquema más exacto (en promedio) para construir la carta de Gurney-Lurie correspondiente a cada tipo de geometría modelo (placa plana infinita de espesor constante, cilindro de longitud infinita y esfera).

3. Modelo matemático

El modelo cuya solución se presenta gráficamente en cada carta de Gurney-Lurie se obtiene de la representación matemática del siguiente fenómeno para cada tipo de geometría:

“Considérese un sólido homogéneo, isotrópico, con difusividad térmica constante (independiente de temperatura), sin generación interna de calor y un valor de temperatura inicial T_0 , el cual es súbitamente inmerso en una masa infinita de fluido de temperatura T_a . Se desea determinar la temperatura en el sólido como función de la posición y el tiempo, $T(x,t)$ o $T(r,t)$.”

Dado que la difusividad térmica es constante aplica la teoría lineal de conducción de calor, por lo que, si no existe generación interna de energía en el sólido y la transferencia es unidimensional, la ecuación general de balance de calor se reduce a la segunda ley de Fourier. La representación esquemática del sistema, la descripción matemática del problema en forma dimensional y adimensional, y su solución analítica se presentan a continuación para cada tipo de geometría.

3.1. Placa plana infinita de espesor constante

En la Fig. 1 se presenta un diagrama del sistema de placa plana infinita de espesor constante.

3.1.1. Modelo matemático dimensional

$$\frac{\partial T}{\partial t} = \alpha \frac{\partial^2 T}{\partial x^2}, \tag{1}$$

con las siguientes condiciones frontera/inicial:

$$\frac{\partial T}{\partial x} = 0, \text{ en } x = 0 \text{ para } t > 0; \tag{2}$$

$$-\frac{\partial T}{\partial x} = \frac{Bi}{L} (T - T_a), \text{ en } x = +L \text{ para } t > 0; \tag{3}$$

$$T = T_0, \text{ en } t = 0 \text{ para } -L \leq x \leq L; \tag{4}$$

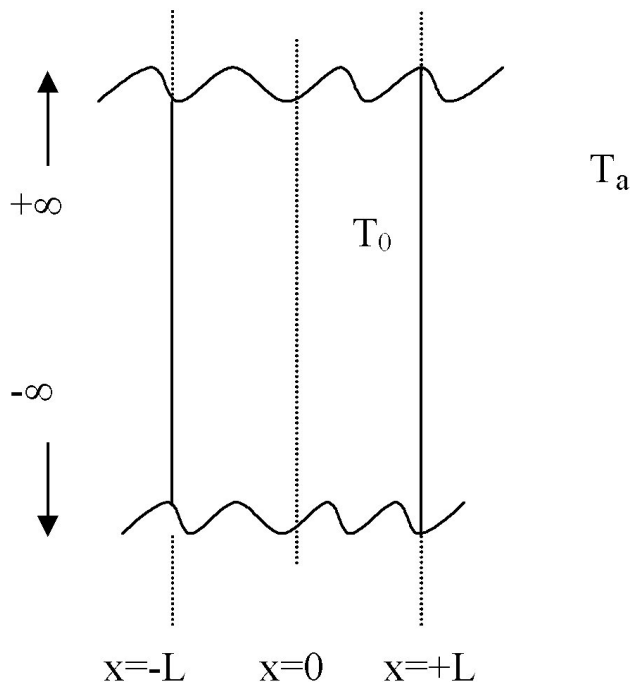


FIGURA 1. Esquema de sólido con geometría tipo placa plana de longitud infinita.

donde

$T = T(x, t)$ = temperatura en el sólido,

t = tiempo,

α = difusividad térmica,

x = posición,

$$Bi = \frac{hL}{k} = \text{número de Biot,}$$

T_a = temperatura del fluido (constante),

T_0 = temperatura inicial del sólido (constante),

h = coeficiente de transferencia convectiva de calor,

L = espesor de la placa,

k = conductividad térmica del sólido

(independiente de temperatura). (5)

La condición frontera en $x = 0$ [Ec. (2)] expresa la simetría del perfil de temperatura en el interior del sólido. La condición frontera para $x = +L$ [Ec. (3)] describe la igualdad del flujo de transferencia de calor por conducción y convección en la superficie de la placa. Por último, la condición inicial [Ec. (4)] representa el estado del sólido para todo $t \leq 0$.

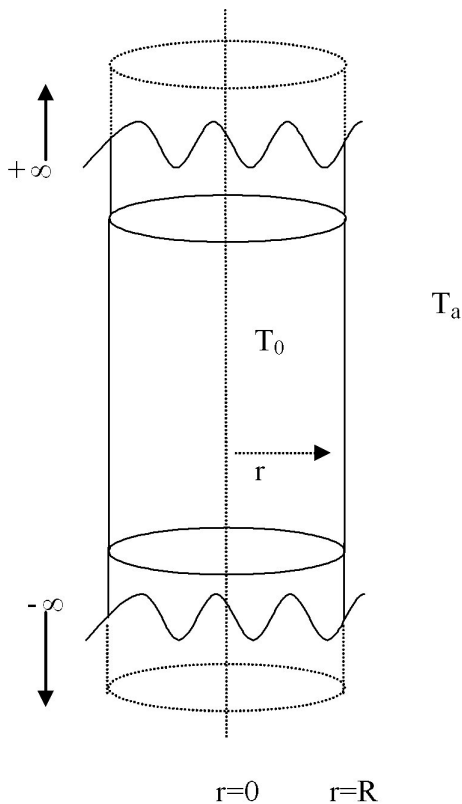


FIGURA 2. Esquema de sólido con geometría tipo cilindro de longitud infinita.

3.1.2. Modelo matemático adimensional

Introduciendo las siguientes variables adimensionales en el modelo matemático formado por las Ecs. (1)-(4),

$$Y = \frac{T - T_a}{T_0 - T_a} = \text{temperatura adimensional}, \quad (6)$$

$$z = \frac{x}{L} = \text{posición adimensional}, \quad (7)$$

$$X_{Fo} = \frac{t}{(L^2/\alpha)} = \text{tiempo adimensional}, \quad (8)$$

es posible expresarlo de manera adimensional como se presenta a continuación.

$$\frac{\partial Y}{\partial X_{Fo}} = \frac{\partial^2 Y}{\partial z^2}, \quad (9)$$

con

$$\frac{\partial Y}{\partial z} = 0, \quad \text{en } z = 0 \quad \text{para } X_{Fo} > 0; \quad (10)$$

$$\frac{\partial Y}{\partial z} + BiY = 0, \quad \text{en } z = 1 \quad \text{para } X_{Fo} > 0; \quad (11)$$

$$Y = 1, \quad \text{en } X_{Fo} = 0, \quad \text{para } -1 \leq z \leq +1. \quad (12)$$

La solución analítica al modelo matemático [Ecs. (9)-(12)] ha sido reportada de la siguiente forma [2]:

$$Y = \sum_{n=1}^{\infty} \frac{4 \operatorname{sen} \beta_n}{2\beta_n + \operatorname{sen} 2\beta_n} \cos(\beta_n z) \exp(-\beta_n^2 X_{Fo}). \quad (13)$$

Los valores característicos β_n son raíces de la siguiente ecuación:

$$\beta_n \tan \beta_n = Bi. \quad (14)$$

Para el caso particular cuando $Bi \rightarrow \infty$, la condición frontera (3) cambia a

$$T = T_a, \quad \text{en } x = +L \quad \text{para } t > 0; \quad (15)$$

y la condición frontera (11) se expresa

$$Y = 0, \quad \text{en } z = +1 \quad \text{para } X_{Fo} > 0; \quad (16)$$

lo cual introduce los siguientes cambios en la solución [2]:

$$Y = \frac{4}{\pi} \sum_{n=0}^{\infty} (-1)^n \frac{\cos[(2n+1)/2] \pi z}{(2n+1)} \times \exp\left[-\frac{(2n+1)^2}{4} \pi^2 X_{Fo}\right]. \quad (17)$$

Es conveniente puntualizar que las anteriores condiciones frontera/inicial no deben tomarse como condiciones que la temperatura T deba satisfacer, por ejemplo, en la superficie del sólido o en el instante $t = 0$; son condiciones al límite. Estas condiciones matemáticas deben entenderse en el sentido de que la temperatura y/o sus derivadas tienden al valor prescrito a medida que uno se aproxima al punto o instante de evaluación [4]. En particular, la condición frontera (15) puede utilizarse cuando un sólido de conductividad térmica (k) muy pequeña es repentinamente inmerso en un líquido para el cual el coeficiente de transferencia convectiva de calor (h) tiene un valor relativamente muy grande, es decir, bajo condiciones donde la resistencia a la transferencia convectiva de calor es despreciable. Esta consideración matemática debe tomarse como una aproximación conveniente a un proceso real en el cual la temperatura superficial es cambiada "muy rápidamente" a la temperatura T_a .

3.2. Cilindro de Longitud Infinita

En la Fig. 2 un diagrama de un cilindro de longitud infinita.

3.2.1. Modelo matemático dimensional

$$\frac{\partial T}{\partial t} = \alpha \left(\frac{\partial^2 T}{\partial r^2} + \frac{1}{r} \frac{\partial T}{\partial r} \right), \quad (18)$$

con

$$\frac{\partial T}{\partial r} = 0, \quad \text{en } r = 0 \quad \text{para } t > 0; \quad (19)$$

$$-\frac{\partial T}{\partial r} = \frac{Bi}{R} (T - T_a), \quad \text{en } r = R \quad \text{para } t > 0; \quad (20)$$

$$T = T_0, \quad \text{en } t = 0 \quad \text{para } r \leq R; \quad (21)$$

donde

$$\begin{aligned}
 r &= \text{dimensión radial,} \\
 Bi &= \frac{hR}{k} = \text{número de Biot,} \\
 R &= \text{radio del cilindro.} \tag{22}
 \end{aligned}$$

La interpretación de las condiciones frontera/inicial anteriores es similar al caso de la placa plana infinita de espesor constante.

3.2.2. Modelo matemático adimensional

Definiendo las siguientes variables adimensionales y substituyéndolas en el modelo matemático integrado por Ecs. (18)-(21),

$$Y = \frac{T - T_a}{T_0 - T_a} = \text{temperatura adimensional,} \tag{23}$$

$$\xi = \frac{r}{R} = \text{radio adimensional,} \tag{24}$$

$$X_{Fo} = \frac{t}{(R^2/\alpha)} = \text{tiempo adimensional,} \tag{25}$$

se obtiene el siguiente modelo adimensional:

$$\frac{\partial Y}{\partial X_{Fo}} = \left(\frac{\partial^2 Y}{\partial \xi^2} + \frac{1}{\xi} \frac{\partial Y}{\partial \xi} \right), \tag{26}$$

con

$$\frac{\partial Y}{\partial \xi} = 0, \text{ en } \xi = 0 \text{ para } X_{Fo} > 0; \tag{27}$$

$$\frac{\partial Y}{\partial \xi} + BiY = 0, \text{ en } \xi = 1 \text{ para } X_{Fo} > 0; \tag{28}$$

$$Y = 1, \text{ en } X_{Fo} = 0 \text{ para } \xi \leq 1. \tag{29}$$

En la literatura [2] se reporta la solución analítica de las Ecs. (26)-(29) como

$$Y = 2Bi \sum_{n=1}^{\infty} \frac{J_0(\beta_n \xi)}{(\beta_n^2 + Bi^2) J_0(\beta_n)} \exp(-\beta_n^2 X_{Fo}). \tag{30}$$

Los valores característicos β_n son raíces de la siguiente ecuación:

$$\beta_n J_1(\beta_n) - Bi J_0(\beta_n) = 0, \tag{31}$$

En las Ecs. (30) y (31), las J son funciones Bessel de orden indicado por el subíndice y primer tipo.

Para el caso particular cuando $Bi \rightarrow \infty$, la condición límite (20) cambia a

$$T = T_a, \text{ en } r = R \text{ para } t > 0; \tag{32}$$

mientras que la condición (28) se transforma en

$$Y = 0, \text{ en } \xi = 1 \text{ para } X_{Fo} > 0. \tag{33}$$

En este caso, la solución analítica también se encuentra disponible [2]:

$$Y = 2 \sum_{n=1}^{\infty} \frac{J_0(\beta_n \xi)}{\beta_n J_1(\beta_n)} \exp(-\beta_n^2 X_{Fo}). \tag{34}$$

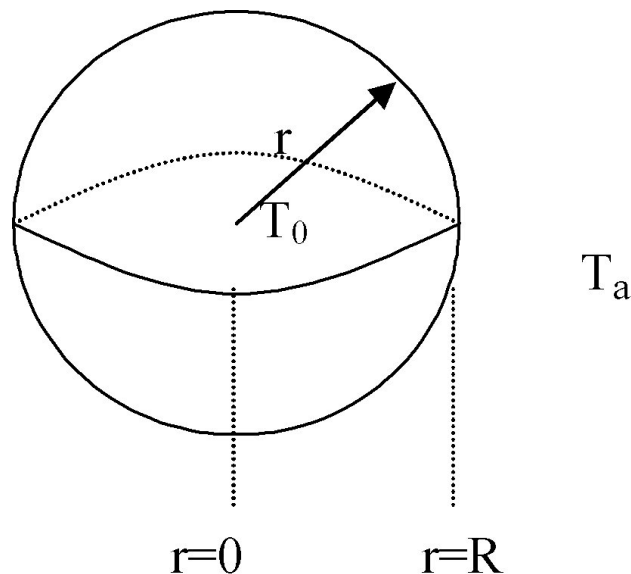


FIGURA 3. Esquema de sólido con geometría tipo esfera.

3.3. Esfera

En la Fig. 3 aparece el esquema de una esfera sólida en la cual ocurre transferencia de calor por conducción.

3.3.1. Modelo matemático dimensional

$$\frac{\partial T}{\partial t} = \alpha \left(\frac{\partial^2 T}{\partial r^2} + \frac{2}{r} \frac{\partial T}{\partial r} \right), \tag{35}$$

con

$$\frac{\partial T}{\partial r} = 0, \text{ en } r = 0 \text{ para } t > 0; \tag{36}$$

$$-\frac{\partial T}{\partial r} = \frac{Bi}{R} (T - T_a), \text{ en } r = R \text{ para } t > 0; \tag{37}$$

$$T = T_0, \text{ en } t = 0 \text{ para } r \leq R. \tag{38}$$

Las condiciones frontera/inicial (36)-(38) tienen una justificación similar a las correspondientes a la geometría tipo placa plana infinita de espesor constante.

3.3.2. Modelo matemático adimensional

Substituyendo las variables adimensionales (23)-(25) en el modelo matemático dimensional descrito por Ecs. (35)-(38), resulta el siguiente conjunto de ecuaciones adimensionales:

$$\frac{\partial Y}{\partial X_{Fo}} = \left(\frac{\partial^2 Y}{\partial \xi^2} + \frac{2}{\xi} \frac{\partial Y}{\partial \xi} \right), \tag{39}$$

con

$$\frac{\partial Y}{\partial \xi} = 0, \quad \text{en } \xi = 0 \quad \text{para } X_{Fo} > 0; \quad (40)$$

$$\frac{\partial Y}{\partial \xi} + BiY = 0, \quad \text{en } \xi = 1 \quad \text{para } X_{Fo} > 0; \quad (41)$$

$$Y = 1, \quad \text{en } X_{Fo} = 0 \quad \text{para } \xi \leq 1. \quad (42)$$

Para el modelo (39)-(42), la solución analítica es [2]

$$Y = 2Bi \frac{1}{\xi} \sum_{n=1}^{\infty} \frac{[\beta_n^2 + (Bi - 1)^2] \text{sen } \beta_n}{\beta_n^2 [\beta_n^2 + Bi(Bi - 1)]} \text{sen}(\beta_n \xi) \times \exp(-\beta_n^2 X_{Fo}). \quad (43)$$

Los valores característicos β_n son raíces de la siguiente ecuación:

$$\beta_n \cot \beta_n + Bi - 1 = 0. \quad (44)$$

Para el caso $Bi \rightarrow \infty$, la condición límite (37) se substituye por

$$T = T_a, \quad \text{en } r = R \quad \text{para } t > 0; \quad (45)$$

y la condición frontera adimensional (41) es reemplazada por

$$Y = 0, \quad \text{en } \xi = 1 \quad \text{para } X_{Fo} > 0. \quad (46)$$

La solución analítica de Ec. (39) satisfaciendo (40), (42) y (46) se expresa [2]:

$$Y = \frac{2}{\xi} \sum_{n=1}^{\infty} \frac{(-1)^{n+1}}{n\pi} \text{sen}(n\pi\xi) \exp(-n^2\pi^2 X_{Fo}). \quad (47)$$

4. Solución numérica

Para obtener la solución numérica del modelo matemático adimensional en cada tipo de geometría, se evaluaron los tres esquemas de diferencia finita más comunes para solución de ecuaciones diferenciales parciales de tipo parabólico (explícito, completamente implícito y Crank-Nicolson) con el fin de seleccionar aquél con el menor error (en promedio) para construir posteriormente la carta de Gurney-Lurie respectiva.

El enfoque utilizado para evaluar la exactitud promedio de cada esquema numérico para la geometría modelo correspondiente involucra los siguientes pasos:

1. Seleccionar el tipo de geometría y la carta de Gurney-Lurie correspondiente. Para fines ilustrativos, considérese la geometría tipo esfera.
2. Discretizar el modelo matemático de transferencia de calor por conducción utilizando el esquema numérico a evaluar. En el Apéndice A se presenta un resumen de las ecuaciones algebraicas resultantes del proceso de discretización del modelo matemático correspondiente

a la geometría tipo esfera empleando los esquemas explícito, completamente implícito y Crank-Nicolson. En la numeración nodal para geometría tipo esfera, $i = 1$ corresponde al centro de la esfera e $i = M+1$ a la superficie del sólido.

3. Determinar el valor máximo permitido para el parámetro de estabilidad (λ) en el esquema explícito, utilizando el método matricial para análisis de estabilidad, ya que éste incluye el efecto de las condiciones límite al obtener el rango permitido para el parámetro λ [5,6]. En el Apéndice B se reporta un resumen del análisis de estabilidad para el esquema explícito, empleando el método matricial en geometría tipo esfera y número de Biot finito, para propósitos explicativos.
4. Definir dos tamaños de cambio para espacio ($\Delta z_1, \Delta z_2$, ó, $\Delta \xi_1, \Delta \xi_2$) y dos tamaños de cambio para tiempo ($\Delta X_{Fo1}, \Delta X_{Fo2}$) que satisfagan λ . Para geometría tipo esfera, sean $M = 10, 40$ nodos (correspondientes a $\Delta \xi_1 = 0.10, \Delta \xi_2 = 0.025$) y $\Delta X_{Fo1} = 0.00005, \Delta X_{Fo2} = 0.0001$.
5. Seleccionar un conjunto específico de valores para ($\Delta z, \Delta X_{Fo}$) ó ($\Delta \xi, \Delta X_{Fo}$) definidos en el paso # 4.
6. Escoger dos valores representativos de número de Biot (Bi_1, Bi_2) en la carta de Gurney-Lurie elegida en el paso # 1. Para geometría tipo esfera, sean $Bi_1 = 0.5, Bi_2 = \infty$.
7. Para Bi_1 , definir en la carta de Gurney-Lurie por generar, dos valores (X_{FoFIN1} y X_{FoFIN2}) para la abscisa X_{Fo} que sean representativos de la línea correspondiente a Bi_1 . Para geometría tipo esfera, sean $X_{FoFIN1} = 1.0, X_{FoFIN2} = 3.0$, para $Bi_1=0.5$; sean $X_{FoFIN1} = 0.25, X_{FoFIN2} = 0.50$ para $Bi_2 = \infty$.
8. Calcular la solución analítica y numérica para el tiempo adimensional X_{FoFIN1} aplicando el código FORTRAN apropiado (escrito por los estudiantes). Expresar el error RMS de acuerdo a

$$RMS_{X_{FoFIN1}} = \sqrt{\sum_{i=1}^{M+1} \frac{1}{(M+1)} \left[\frac{Y_{i,\text{analítica}} - Y_{i,\text{numérica}}}{Y_{i,\text{analítica}}} \right]^2} \Bigg|_{X_{FoFIN1}}. \quad (48)$$

9. Repetir el paso # 8 para el tiempo adimensional X_{FoFIN2} definido en el paso # 7. Realizar los cambios apropiados en la Ec. (48).
10. Evaluar el error RMS para Bi_1 utilizando la siguiente expresión

$$RMS_{Bi1} = \frac{1}{2} (RMS_{X_{FoFIN1}} + RMS_{X_{FoFIN2}}) \quad (49)$$

11. Repetir los pasos # 7 a 10 para el valor de número de Biot Bi_2 , obteniéndose de esta forma RMS_{Bi2} .
12. Calcular RMS_{PROM} para el conjunto de valores de número de Biot de acuerdo a la expresión

$$RMS_{PROM} = \frac{1}{2} (RMS_{Bi1} + RMS_{Bi2}) \quad (50)$$

13. Repetir los pasos # 5 a 12 con el fin de calcular RMS_{PROM} para cada combinación de valores para $(\Delta z, \Delta X_{Fo})$ ó $(\Delta \xi, \Delta X_{Fo})$ definidos en el paso # 4, reportando los resultados en una tabla de errores RMS_{PROM} para cada esquema de discretización.
14. Seleccionar el conjunto de valores $(\Delta z, \Delta X_{Fo})$ ó $(\Delta \xi, \Delta X_{Fo})$ y el esquema de discretización con el menor error RMS_{PROM} para construir la carta de Gurney-Lurie correspondiente.

5. Resultados

En la Tabla I se presenta un resumen de los resultados obtenidos del análisis de estabilidad del esquema explícito, mediante el método matricial para cada geometría.

TABLA I. Rangos de estabilidad para el parámetro λ , esquema explícito.

Geometría	Número de Biot Finito	Número de Biot Infinito
Placa Plana	$\lambda \leq \frac{1}{2+Bi(\Delta Z)}$	$\lambda \leq \frac{1}{2}$
Cilindro	$\lambda \leq \min \left\{ \frac{1}{4}, \frac{1}{2+Bi(\Delta \xi)(1+\frac{1}{2M})} \right\}$	$\lambda \leq \frac{1}{4}$
Esfera	$\lambda \leq \min \left\{ \frac{1}{6}, \frac{1}{2+Bi(\Delta \xi)(1+\frac{1}{M})} \right\}$	$\lambda \leq \frac{1}{6}$

TABLA II. Resultados de RMS_{PROM} para geometría tipo esfera.

Esquema	$\Delta \xi_1=0.10$	$\Delta X_{Fo1}=0.00005$	$\Delta X_{Fo2}=0.00010$
Explícito	$\Delta \xi_1=0.10$ (M=10)	0.0105198	0.0103282
	$\Delta \xi_2=0.025$ (M=40)	0.0005564	0.0005861
Implícito	$\Delta \xi_1=0.10$ (M=10)	0.0112330	0.0117157
	$\Delta \xi_2=0.025$ (M=40)	0.0013065	0.0018052
Crank-Nicolson	$\Delta \xi_1=0.10$ (M=10)	0.0119934	0.0121102
	$\Delta \xi_2=0.025$ (M=40)	0.0009492	0.0010706

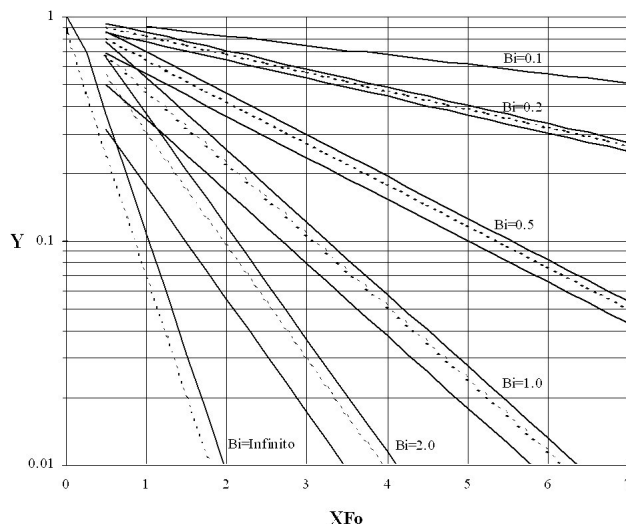


FIGURA 4. Carta de Gurney-Lurie generada numéricamente para placa plana.

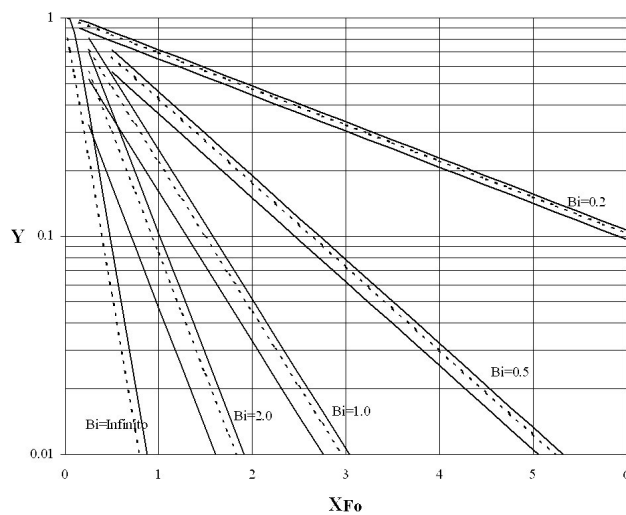


FIGURA 5. Carta de Gurney-Lurie generada numéricamente para cilindro.

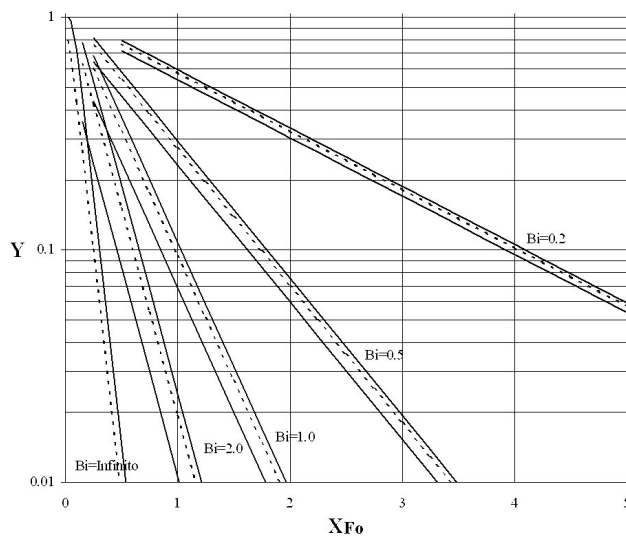


FIGURA 6. Carta de Gurney-Lurie generada numéricamente para esfera.

Los resultados para el valor de error RMS_{PROM} en el caso ilustrativo de geometría tipo esfera se presentan en la Tabla II.

Los valores reportados en la Tabla II indican que para el caso ilustrativo de geometría tipo esfera, el menor error RMS_{PROM} se obtuvo utilizando el esquema explícito con $M = 40$ nodos y un valor de $\Delta X_{Fo} = 0.00005$. Utilizando un enfoque similar para geometría tipo placa plana y cilindro, en nuestros experimentos numéricos y para los tamaños de paso de tiempo y espacio utilizados, el menor RMS_{PROM} ocurrió también para el esquema explícito.

Estos resultados obtenidos para un conjunto específico de tamaños de paso de tiempo y espacio, permitieron a nuestros estudiantes comparar la teoría sobre errores de truncamiento y redondeo de esquemas numéricos con su implementación práctica. De acuerdo a su error de truncamiento el esquema Crank-Nicolson, aplicado al caso particular del modelo para geometría esférica, tiene un error del orden $(\Delta X_{Fo}^2, \Delta \xi^2)$, mientras que el implícito es del orden $(\Delta X_{Fo}, \Delta \xi^2)$ y el explícito tiene un error $(\Delta X_{Fo}, \Delta \xi^2)$. Basándose únicamente en el error de truncamiento, los resultados más exactos deben obtenerse con el esquema Crank-Nicolson. Sin embargo, el error total de la solución numérica obtenida con un esquema de discretización particular está integrado por el error de truncamiento más el error de redondeo [7]. Este último está relacionado con el error introducido debido a que la computadora al calcular la solución numérica realiza todas sus operaciones con un número finito de decimales, de tal forma que mientras mayor sea el número de operaciones requeridas por un esquema de discretización específico, es de esperar un mayor error de redondeo. En los esquemas implícito y Crank-Nicolson es necesario resolver un sistema de "M+1" o "M" ecuaciones lineales algebraicas (para el caso del número de Biot finito o infinito, respectivamente), en cada paso de tiempo, lo cual incrementa el número de operaciones requeridas (y proporcionalmente el error de redondeo) comparado con el método explícito en el cual se obtiene de forma directa la solución numérica.

Asimismo, una combinación apropiada de tamaños de paso $(\Delta \xi, \Delta X_{Fo})$, puede alterar el orden de error de truncamiento de un esquema dado, incrementando en algunos casos su exactitud. Debido a lo anterior, no siempre resulta que el esquema de menor error de truncamiento teórico arroja los resultados de menor error total en la solución numérica como es el caso reportado en la Tabla II para las combinaciones $(\Delta \xi, \Delta X_{Fo})$ empleadas en el experimento numérico.

Estos resultados pueden ser utilizados durante las sesiones de clase con los estudiantes como base para discusiones acerca de los distintos tipos de errores involucrados en cálculos numéricos utilizando métodos de diferencias finitas, resultados obtenidos a través de experimentación numérica. Es posible utilizar distintos conjuntos de valores para $(\Delta \xi, \Delta X_{Fo})$ y obtener conclusiones diferentes en cuanto al esquema más exacto debido a lo mencionado anteriormente y

a que el tamaño de los intervalos $(\Delta \xi, \Delta X_{Fo})$ afecta el error de truncamiento y el error de redondeo en sentido opuesto. El primero decrece a medida que el tamaño de malla disminuye, mientras que el segundo generalmente se incrementa.

Una vez identificados los esquemas que produjeron el menor error RMS_{PROM} en cada geometría, se generaron las cartas de Gurney-Lurie correspondientes. Microsoft ExcelTM fue utilizado por los estudiantes para graficar los datos obtenidos (Figs. 4-6), empleando una escala normal para X_{Fo} y una escala logarítmica para la temperatura adimensional, Y . Las gráficas obtenidas numéricamente resultan indistinguibles de las reportadas en la literatura [2].

En las Figs. 4-6 se aprecian tres líneas para cada valor de número de Biot: la línea superior representa el valor "Y" en el centro del sólido, la línea discontinua expresa el valor de "Y" promediada en todo el sólido y la línea inferior es el valor de "Y" en la superficie del sólido. La única excepción ocurre para $Bi = \infty$, debido a que la superficie tiene un valor de $Y=0$ todo el tiempo y por ello no se muestra línea.

Los resultados reportados anteriormente se pueden extrapolar directamente al fenómeno de transferencia de materia por difusión en estado no estacionario en el interior de sólidos de la misma geometría, en analogía al proceso de transferencia de calor analizado en este trabajo, substituyendo la variable temperatura por concentración, la difusividad térmica por la de masa, etc.

6. Conclusiones

En este reporte hemos descrito un ejercicio numérico que puede ser utilizado como apoyo didáctico en cursos de postgrado relacionados con aplicaciones de métodos numéricos en la solución de ecuaciones diferenciales parciales en ciencias e ingeniería. Este proyecto computacional estimula el interés de la clase, debido a que los estudiantes emplean los conceptos analizados durante las sesiones teóricas en un ejercicio de mayor profundidad, el cual se desarrolla a lo largo de todo un semestre, y adicionalmente tiene un carácter integrativo ya que incluye desde los principios de discretización por diferencias finitas hasta la aplicación del método matricial para análisis de estabilidad de esquemas numéricos, el cual en el presente caso se utilizó en lugar del método de Fourier con base en la inclusión de las condiciones límite en el estudio de estabilidad. En el desarrollo del presente ejercicio, los estudiantes trabajaron sus soluciones analíticas y numéricas utilizando FORTRAN 77. Los códigos en FORTRAN 77, así como los reportes completos de análisis de estabilidad para cada tipo de geometría, están disponibles por parte de los autores.

Agradecimientos

Se agradecen los comentarios de los árbitros anónimos de este manuscrito.

Apéndice A

Ecuaciones algebraicas resultantes de la discretización del modelo matemático adimensional para geometría tipo esfera.

A.1 Esquema: Explícito, Biot: Finito

$$\begin{aligned}
 Y_1^{j+1} &= (1 - 6\lambda) Y_1^j + 6\lambda Y_2^j, & i = 1; \\
 Y_i^{j+1} &= \lambda \left(1 - \frac{1}{(i-1)} \right) Y_{i-1}^j + (1 - 2\lambda) Y_i^j + \lambda \left(1 + \frac{1}{(i-1)} \right) Y_{i+1}^j, & i = 2, \dots, M; \\
 Y_{M+1}^{j+1} &= 2\lambda Y_M^j + \left\{ 1 - 2\lambda \left[1 + Bi(\Delta\xi) \left(1 + \frac{1}{M} \right) \right] \right\} Y_{M+1}^j, & i = M + 1.
 \end{aligned}$$

A.2 Esquema: Explícito, Biot: Infinito

$$\begin{aligned}
 Y_1^{j+1} &= (1 - 6\lambda) Y_1^j + 6\lambda Y_2^j, & i = 1; \\
 Y_i^{j+1} &= \lambda \left(1 - \frac{1}{(i-1)} \right) Y_{i-1}^j + (1 - 2\lambda) Y_i^j + \lambda \left(1 + \frac{1}{(i-1)} \right) Y_{i+1}^j, & i = 2, \dots, M; \\
 Y_{M+1}^{j+1} &= 0, & i = M + 1.
 \end{aligned}$$

A.3 Esquema: Implícito, Biot: Finito

$$\begin{aligned}
 (1 + 6\lambda) Y_1^{j+1} - 6\lambda Y_2^{j+1} &= Y_1^j, & i = 1; \\
 \lambda \left(\frac{1}{(i-1)} - 1 \right) Y_{i-1}^{j+1} + (1 + 2\lambda) Y_i^{j+1} - \lambda \left(1 + \frac{1}{(i-1)} \right) Y_{i+1}^{j+1} &= Y_i^j, & i = 2, \dots, M; \\
 -2\lambda Y_M^{j+1} + \left\{ 1 + 2\lambda \left[1 + Bi(\Delta\xi) \left(1 + \frac{1}{M} \right) \right] \right\} Y_{M+1}^{j+1} &= Y_{M+1}^j, & i = M + 1.
 \end{aligned}$$

A.4 Esquema: Implícito, Biot: Infinito

$$\begin{aligned}
 (1 + 6\lambda) Y_1^{j+1} - 6\lambda Y_2^{j+1} &= Y_1^j, & i = 1; \\
 \lambda \left(\frac{1}{(i-1)} - 1 \right) Y_{i-1}^{j+1} + (1 + 2\lambda) Y_i^{j+1} - \lambda \left(1 + \frac{1}{(i-1)} \right) Y_{i+1}^{j+1} &= Y_i^j, & i = 2, \dots, M - 1; \\
 \lambda \left(\frac{1}{M-1} - 1 \right) Y_{M-1}^{j+1} + (1 + 2\lambda) Y_M^{j+1} &= Y_M^j, & i = M; \\
 Y_{M+1}^{j+1} &= 0, & i = M + 1.
 \end{aligned}$$

A.5 Esquema: Crank-Nicolson, Biot: Finito

$$\begin{aligned}
 (1 + 3\lambda) Y_1^{j+1} - 3\lambda Y_2^{j+1} &= (1 - 3\lambda) Y_1^j + 3\lambda Y_2^j, & i = 1; \\
 \frac{\lambda}{2} \left[\frac{1}{(i-1)} - 1 \right] Y_{i-1}^{j+1} + (1 + \lambda) Y_i^{j+1} - \frac{\lambda}{2} \left[1 + \frac{1}{(i-1)} \right] Y_{i+1}^{j+1} &= \frac{\lambda}{2} \left[1 - \frac{1}{(i-1)} \right] Y_{i-1}^j \\
 &+ (1 - \lambda) Y_i^j + \frac{\lambda}{2} \left[1 + \frac{1}{(i-1)} \right] Y_{i+1}^j, & i = 2, \dots, M; \\
 -\lambda Y_M^{j+1} + \left\{ 1 + \lambda \left[1 + Bi(\Delta\xi) \left(1 + \frac{1}{M} \right) \right] \right\} Y_{M+1}^{j+1} &= \lambda Y_M^j \\
 &+ \left\{ 1 - \lambda \left[1 + Bi(\Delta\xi) \left(1 + \frac{1}{M} \right) \right] \right\} Y_{M+1}^j, & i = M + 1.
 \end{aligned}$$

A.6 Esquema: Crank-Nicolson, Biot: Infinito

$$\begin{aligned}
 (1 + 3\lambda) Y_1^{j+1} - 3\lambda Y_2^{j+1} &= (1 - 3\lambda) Y_1^j + 3\lambda Y_2^j, & i = 1; \\
 \frac{\lambda}{2} \left[\frac{1}{(i-1)} - 1 \right] Y_{i-1}^{j+1} + (1 + \lambda) Y_i^{j+1} - \frac{\lambda}{2} \left[1 + \frac{1}{(i-1)} \right] Y_{i+1}^{j+1} \\
 &= \frac{\lambda}{2} \left[1 - \frac{1}{(i-1)} \right] Y_{i-1}^j + (1 - \lambda) Y_i^j + \frac{\lambda}{2} \left[1 + \frac{1}{(i-1)} \right] Y_{i+1}^j & i = 2, \dots, M - 1; \\
 \frac{\lambda}{2} \left[\frac{1}{(M-1)} - 1 \right] Y_{M-1}^{j+1} + (1 + \lambda) Y_M^{j+1} \\
 &= \frac{\lambda}{2} \left[1 - \frac{1}{(M-1)} \right] Y_{M-1}^j + (1 - \lambda) Y_M^j + \frac{\lambda}{2} \left(1 + \frac{1}{(M-1)} \right) Y_{M+1}^j, & i = M; \\
 Y_{M+1}^{j+1} &= 0, & i = M + 1.
 \end{aligned}$$

Apéndice B

Análisis de estabilidad para el esquema explícito empleando el método matricial en geometría tipo esfera y número de Biot finito.

Resumen de ecuaciones algebraicas para geometría tipo esfera y número de Biot finito (ver Apéndice A)

$$\begin{aligned}
 Y_1^{j+1} &= (1 - 6\lambda) Y_1^j + 6\lambda Y_2^j, & i = 1; \\
 Y_i^{j+1} &= \lambda \left(1 - \frac{1}{(i-1)} \right) Y_{i-1}^j + (1 - 2\lambda) Y_i^j + \lambda \left(1 + \frac{1}{(i-1)} \right) Y_{i+1}^j, & i = 2, \dots, M; \\
 Y_{M+1}^{j+1} &= 2\lambda Y_M^j + \left\{ 1 - 2\lambda \left[1 + Bi(\Delta\xi) \left(1 + \frac{1}{M} \right) \right] \right\} Y_{M+1}^j, & i = M + 1.
 \end{aligned}$$

En la Fig. B.1 se presenta en forma matricial el sistema de ecuaciones generado a partir de las expresiones anteriores. En esta figura, el valor de ε (una constante) está dado de la siguiente manera:

$$\varepsilon = 1 - 2\lambda \left[1 + Bi(\Delta\xi) \left(1 + \frac{1}{M} \right) \right]. \tag{51}$$

Asimismo, es importante resaltar que los componentes del vector columna al final del lado derecho de la ecuación matricial de la Fig. B.1 son todos valores constantes, por lo que la matriz que determina la propagación del error es la que aparece en primer término en el lado derecho de la ecuación matricial.

La aplicación directa del teorema del círculo de Gerschgorin [5] permite determinar una cota superior para los eigenvalores de la matriz de propagación del error que se presenta en la Fig. B.1 y para el valor límite permitido del parámetro de estabilidad (λ) correspondiente al esquema explícito.

$$\begin{array}{l}
 i = 1 \\
 i = 2 \\
 i = 3 \\
 i = 4 \\
 \bullet \\
 \bullet \\
 \bullet \\
 i = M \\
 i = M + 1
 \end{array}
 \begin{bmatrix}
 Y_1^{j+1} \\
 Y_2^{j+1} \\
 Y_3^{j+1} \\
 Y_4^{j+1} \\
 \bullet \\
 \bullet \\
 \bullet \\
 Y_M^{j+1} \\
 Y_{M+1}^{j+1}
 \end{bmatrix}
 =
 \begin{bmatrix}
 (1 - 6\lambda) & (6\lambda) & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\
 0 & (1 - 2\lambda) & (2\lambda) & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\
 0 & (\frac{\lambda}{2}) & (1 - 2\lambda) & (\frac{3}{2}\lambda) & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\
 0 & 0 & (\frac{2}{3}\lambda) & (1 - 2\lambda) & (\frac{4}{3}\lambda) & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\
 0 & 0 & 0 & \bullet & \bullet & \bullet & 0 & 0 & 0 & 0 \\
 0 & 0 & 0 & 0 & \bullet & \bullet & \bullet & 0 & 0 & 0 \\
 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & \bullet & \bullet & \bullet & 0 & 0 \\
 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & \lambda \left(1 - \frac{1}{M-1} \right) & (1 - 2\lambda) & \lambda \left(1 + \frac{1}{M-1} \right) & 0 \\
 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 2\lambda & \varepsilon & 0
 \end{bmatrix}
 \begin{bmatrix}
 Y_1^j \\
 Y_2^j \\
 Y_3^j \\
 Y_4^j \\
 \bullet \\
 \bullet \\
 \bullet \\
 Y_M^j \\
 Y_{M+1}^j
 \end{bmatrix}$$

FIGURA B.1. Ecuación matricial para el esquema explícito, geometría tipo esfera, Biot finito.

A continuación se presenta la aplicación del Teorema del Círculo de Gerschgorin para algunos nodos críticos de la matriz de propagación de error de la Fig. B.1. Para este análisis, considere P_S = Suma de los módulos de los elementos sobre la fila "s" de la matriz, excluyendo el elemento de la diagonal a_{SS} .

a) $i = 1$

Para este caso $a_{ss} = (1 - 6\lambda)$, $P_S = 6\lambda$, por lo que algunos de los eigenvalores de esta matriz deben localizarse en $|\eta - \{1 - 6\lambda\}| \leq 6\lambda$. Por lo tanto,

$$\eta_1 = (1 - \lambda) - 6\lambda = 1 - 12\lambda, \quad (\text{B.1})$$

$$\eta_2 = (1 - 6\lambda) + 6\lambda = 1. \quad (\text{B.2})$$

Para satisfacer el criterio de estabilidad de Lax-Richtmyer, se requiere $|\eta_1| \leq 1$, $|\eta_2| \leq 1$. De acuerdo a Ec. (B.3), η_2 sí cumple con este criterio. Para η_1 se tiene

$$-1 \leq 1 - 12\lambda \leq 1, \quad (\text{B.3})$$

entonces

$$\lambda \leq \frac{1}{6}. \quad (\text{B.4})$$

b) $i = 2, 3, \dots, M$

Para este caso $a_{SS} = (1 - 2\lambda)$, $P_S = |2\lambda| = 2\lambda$, por lo que algunos de los eigenvalores de esta matriz deben localizarse en $|\eta - \{1 - 2\lambda\}| \leq 2\lambda$. Por lo tanto,

$$\eta_1 = (1 - 2\lambda) - 2\lambda = 1 - 4\lambda, \quad (\text{B.5})$$

$$\eta_2 = (1 - 2\lambda) + 2\lambda = 1. \quad (\text{B.6})$$

La satisfacción del criterio de estabilidad de Lax-Richtmyer, requiere cumplir $|\eta_1| \leq 1$, $|\eta_2| \leq 1$. De acuerdo a Ec. (B.6), η_2 cumple con este criterio. Para η_1 se tiene:

$$-1 \leq 1 - 4\lambda \leq 1,$$

entonces

$$\lambda \leq \frac{1}{2}. \quad (\text{B.7})$$

c) $i = M+1$

Para este caso

$$a_{SS} = \varepsilon = \left\{ 1 - 2\lambda \left[1 + Bi(\Delta\xi) \left(1 + \frac{1}{M} \right) \right] \right\},$$

$$P_S = |2\lambda| = 2\lambda,$$

por lo que algunos de los eigenvalores de esta matriz deben localizarse en $|\eta - \varepsilon| \leq 2\lambda$. Por lo tanto,

$$\eta_1 = \varepsilon - 2\lambda, \quad (\text{B.8})$$

$$\eta_2 = \varepsilon + 2\lambda. \quad (\text{B.9})$$

Para cumplir el criterio de estabilidad de Lax-Richtmyer, se requiere $|\eta_1| \leq 1$, $|\eta_2| \leq 1$.

Para η_1 , de la Ec. (B.8), substituyendo la equivalencia para ε y despejando, se tiene

$$\lambda \leq \frac{1}{2 + Bi(\Delta\xi) \left(1 + \frac{1}{M} \right)}. \quad (\text{B.10})$$

Para η_2 , de la Ec. (B.9), substituyendo la equivalencia para ε y despejando, se tiene

$$\lambda \leq \frac{1}{Bi(\Delta\xi) \left(1 + \frac{1}{M} \right)}. \quad (\text{B.11})$$

El parámetro expresado por (B.10) es menor que (B.11).

En resumen, el parámetro λ que debe utilizarse para estabilidad global es el menor valor de las expresiones (B.4), (B.7) o (B.10), es decir,

$$\lambda \leq \min \left\{ \frac{1}{6}, \frac{1}{2 + Bi(\Delta\xi) \left(1 + \frac{1}{M} \right)} \right\}. \quad (\text{B.12})$$

-
1. H.P. Gurney and J. Lurie, *Ind. Eng. Chem.* **15** (1923) 1170.
 2. S. Middleman, *An Introduction to Mass and Heat Transfer* (John Wiley and Sons, New York, 1998).
 3. C.A.J. Fletcher, *Computational Techniques for Fluid Dynamics* v.1 (Springer Verlag, New York, 1988).
 4. H.S. Carslaw and J.C. Jaeger, *Conduction of Heat in Solids* (Clarendon Press, Oxford, 1947).
 5. G.D. Smith, *Numerical Solution of Partial Differential Equations: Finite Difference Methods*, 3rd ed. (Oxford University Press, New York, 1989).
 6. J.W. Thomas, *Numerical Partial Differential Equations: Finite Difference Methods* (Springer Verlag, New York, 1995).
 7. W.F. Ames, *Numerical Methods for Partial Differential Equations* (Academic Press, New York, 1977).