



UNIVERSIDAD DE GUADALAJARA

CENTRO UNIVERSITARIO DE CIENCIAS EXACTAS E INGENIERIAS

DIVISIÓN DE INGENIERÍAS

DEPARTAMENTO DE INGENIERÍA QUÍMICA

“COMPARACIÓN DE MÉTODOS NUMÉRICOS PARA
LA SIMULACIÓN DE POLIMERIZACIONES ESTÁTICAS”

T E S I S

QUE PARA OBTENER EL GRADO
DE MAESTRO EN CIENCIAS EN
INGENIERÍA QUÍMICA PRESENTA:
I.Q. JUAN JORGE HERMOSILLO VILLALOBOS

GUADALAJARA, JAL.

ABRIL DE 2004



*Los libros tienen
los mismos enemigos que el hombre:
el fuego, la humedad, las alimañas,
y su propio contenido.*

Paul Valéry

A la memoria de

Jorge Villalobos Padilla, S.J.

con quien aprendí a valorar la ciencia
como un producto humano útil para las personas
y disfrutable en sí mismo

La realización del presente trabajo fue posible gracias a la ayuda, influencia y colaboración de muchas personas.

Agradezco, en primer lugar, al Dr. Víctor Manuel González Romero su asesoría en la elaboración de esta tesis, así como su apoyo y confianza incondicional como maestro y amigo.

Agradezco al Conacyt el haberme otorgado la beca No. 40515 para la terminación de mis estudios de maestría y para la elaboración de esta tesis.

A las autoridades del ITESO durante la realización del presente trabajo, agradezco su apoyo para mi superación académica al haberme otorgado una licencia temporal: al Dr. Luis Morfín López, S.J., ex-rector; al Ing. Manuel de la Torre Rodarte, ex-director de la División de Ingeniería y al Ing. Ramón Alvarado de la Torre, por entonces coordinador del Grupo Solar, donde yo laboraba.

Agradezco a mis compañeros del Laboratorio de Redes Poliméricas de la Facultad de Ciencias Químicas de la Universidad de Guadalajara su camaradería y hospitalidad mientras realizaba la parte principal de este trabajo.

A Gaby de la Torre, debo reconocer y agradecer su comprensión en todo el proceso y su participación en la solución de muchos detalles importantes.

En la etapa final fue clave el impulso de David López Castillo y Enrique Arriola Guevara.

Resumen

En el presente trabajo se realiza una comparación de diversos métodos utilizados para resolver numéricamente un modelo matemático planteado para una polimerización estática, particularmente en lo relativo a la transferencia de calor. La geometría es unidimensional en el espacio, con simetría respecto de un plano central y condiciones variables o ajustables en la frontera del sistema. Este modelo no puede resolverse analíticamente, por lo que se requiere una solución numérica. Los métodos numéricos utilizados para la comparación son de tres tipos: diferencias finitas, colocación ortogonal y elementos finitos. Para diferencias finitas se utilizan tres variantes: hacia adelante, hacia atrás y el método de Crank-Nicolson. En elementos finitos se utilizan tres tipos de polinomios: de primer grado, de segundo grado y de Hermite. En todos los casos se utiliza el método de Runge-Kutta de cuarto orden, con extrapolación de Richardson, para integrar la ecuación de la velocidad de reacción, es decir, para obtener la generación de calor instantánea en cada nodo espacial y temporal e incorporarla a la transferencia de calor.

La estrategia de comparación comprende: a) Comparar y analizar los resultados obtenidos para un caso adiabático. b) Determinar las limitaciones de los diversos métodos respecto de la posibilidad de resolver el modelo planteado. c) Comparar los métodos que lo permiten, con un caso relativamente similar en su aspecto matemático para el cual exista una solución analítica, aunque no corresponda a una polimerización estática. Esta etapa da las bases para escoger un método como referencia para las demás comparaciones, en el caso en el que no existe solución analítica. d) Comparar los métodos que lo permiten, en la solución de un caso con pared isotérmica. e) Comparar todos los métodos en la solución de un caso intermedio entre el adiabático y el de pared isotérmica.

Los resultados encontrados son: a) Dada la diversidad de condiciones y resultados obtenidos, no existe un método que muestre completa superioridad en todos los casos, sino sólo en condiciones específicas. b) Se utilizó como referencia para las comparaciones el método de Crank-Nicolson, lo cual supone cierta confiabilidad encontrada en éste. En casos particulares, especialmente cuando se utilizan pocos nodos espaciales, otros métodos, como el de colocación ortogonal y elementos finitos con polinomios de Hermite, producen un menor error. c) La principal causa de divergencia se debe a la generación de calor interna por la reacción química. Ésta puede presentarse en cualquier método y puede depender de los parámetros asignados para el cálculo, como el tamaño de paso temporal y no sólo de las características propias del método. d) La siguiente causa de divergencia o inexactitud es la aparición de una “oscilación” de la temperatura de la pared del molde, carente de significado físico, asociada con la condición de frontera que se utilizó para el modelado matemático. e) Si no se presenta divergencia ni oscilación, todos los métodos convergen a resultados similares, aunque con diferentes magnitudes de error involucrado. f) El error generado por cada método depende del tamaño de paso temporal y de la cantidad de nodos espaciales, en forma característica para cada uno, por lo que no se encontró un único método recomendable. g) En general se obtiene mayor reducción del error cuando se disminuye el tamaño de paso temporal que cuando se aumenta el número de nodos espaciales. Además, la reducción del tamaño de paso temporal implica generalmente menos trabajo de cómputo que el aumento del número de nodos espaciales.

Contenidos

Resumen	iii
Contenidos	iv
Capítulo I	
El Problema Físico y su Formulación Matemática	
• Introducción	1
• Modelo Matemático	3
• Adimensionalización del Modelo	8
• Resultados Típicos del Modelo	10
• Solución de Algunos Casos Particulares	15
• Nomenclatura del Capítulo I	17
Capítulo II	
Métodos Numéricos	
• Estrategia General de Solución	19
• Diferencias Finitas	20
• Condiciones en las Fronteras en los Métodos de Diferencias Finitas	23
• Residuos Ponderados	24
• Colocación Ortogonal	25
• Colocación Ortogonal en la Ecuación de Calor	29
• Condiciones en las Fronteras en el Método de Colocación Ortogonal	30
• Generación de las Matrices A y B para Colocación Ortogonal	31
• Elementos Finitos	32
• Elementos Finitos en la Ecuación de Calor	33
• Funciones Base Lineales	35
• Funciones Base Cuadráticas	36
• Funciones Base Cúbicas de Hermite	37
• Nomenclatura del Capítulo II	39
Capítulo III	
Comparación de los Métodos Numéricos	
• El Programa de Cómputo	41
• Definiciones y Abreviaturas	41
• Esquema General de Comparación de los Métodos Numéricos	43
• Comparación del Caso Adiabático	43
• Oscilación de la Temperatura en la Pared	47
• Número de Biot Crítico como función del Tamaño de las Divisiones Espaciales	48
• Número de Biot Crítico como Función del Tamaño de Paso Temporal	54
• Otras Causas de Divergencia	57
• Comparación de Resultados	58

• Comparación con la Solución Analítica	60
• Comparación del Caso con Pared Isotérmica	62
• Comparación de Casos Generales con Número de Biot = 5	64
• Nomenclatura del Capítulo III	74
Conclusiones	75
Referencias	79
Anexo I. Tablas Numéricas para Colocación Ortogonal	81
Anexo II. Programa para la Generación de las Matrices para Colocación Ortogonal	83
Anexo III. Programa para Simular Polimerizaciones Estáticas y Comparar los Métodos Numéricos	86
Anexo IV. Programas Complementarios	108
Anexo V. Resultados Numéricos	121

Capítulo I

El Problema Físico y su Formulación Matemática

*El arte de razonar no es más
que una lengua bien hecha.*
Condillac

Introducción

Los materiales poliméricos, mejor conocidos como “plásticos”, tienen cada vez mayor importancia desde diversos puntos de vista. En un número cada vez mayor de ramas de la industria los costos de producción de objetos de plástico son menores que los de otros materiales cuyas funciones pueden ser equivalentes. Sus propiedades físicas y químicas, para algunas aplicaciones, son incluso superiores a las de muchos materiales convencionales. Una fracción importante de los bienes y servicios que son comunes en la civilización actual no serían posibles si no existieran los plásticos.

Los plásticos pueden ser considerados como materiales artificiales, en el sentido de que no son productos de procesos naturales, sino que han sido producidos mediante la tecnología que el hombre ha desarrollado. A diferencia de la piedra, el barro, el vidrio, la madera, el cuero, el oro, la plata, etc., que tienen unas propiedades físicas y químicas características, dependiendo de su especie, los plásticos pueden ser fabricados con una inmensa variedad de propiedades, que dan lugar a una gran variedad de usos: desde las fibras para el vestido cotidiano hasta las especializadas para chalecos antibalas; desde el material de los juguetes más baratos hasta el encapsulado de los componentes electrónicos más sofisticados.

La gran variedad de materiales plásticos disponibles en la actualidad, y los que se están desarrollando, han sido producto de trabajo teórico y empírico para entender los procesos de formación de las macromoléculas que los constituyen y para crear tecnología que permita su uso en aplicaciones prácticas. En este contexto, el modelado matemático y la solución de los modelos mediante computadoras digitales, de los procesos involucrados, han permitido la intelección de los procesos físicos y químicos y la mejora del diseño y el control de los procesos de fabricación de plásticos como materias primas y de productos de estos materiales.

Existen varios procesos típicos para el procesamiento de plásticos. Uno de éstos, de gran importancia industrial, es el moldeo por inyección reactiva, MIR (comúnmente abreviado también “RIM” por su nombre en inglés: reaction injection molding). Aunque existen algunas variantes de este proceso, fundamentalmente consiste en lo siguiente: se tienen preparados los reactivos –en fase líquida y con baja viscosidad– en recipientes separados, de donde son alimentados a una cabeza de mezclador. Allí se mezclan en forma violenta e inmediatamente se inyectan a un molde que tiene la forma de la pieza que se quiere fabricar. La solidificación de la pieza se lleva a cabo por el proceso de polimerización del monómero u oligómero, lo que puede acontecer en unos cuantos segundos. Esto permite la fabricación en serie de piezas

grandes y de forma caprichosa, en un tiempo excepcionalmente corto, con gran ahorro de recursos, particularmente tiempo y energía.

Otro proceso común, más tradicional en la fabricación de productos plásticos, es el moldeo por inyección de un polímero fundido. Existen varias diferencias importantes entre éste y el moldeo por inyección reactiva, que hacen a éste último sumamente interesante. Un polímero fundido es varios órdenes de magnitud más viscoso que los reactivos de los cuales se forma, con las consiguientes dificultades de bombeo y llenado del molde. Éste, por su parte, debe ser mucho más robusto para poder trabajar a presiones mucho mayores, con el consiguiente aumento en los costos. La baja viscosidad de los reactivos, típica del MIR, permite también la fabricación de piezas de plástico reforzado con algún material previamente dispuesto en el molde. Por otro lado, las temperaturas normalmente requeridas para manejar un polímero fundido son mucho mayores que las requeridas para producir una reacción de polimerización en condiciones adecuadas. Por último, el moldeo por inyección reactiva permite la fabricación de piezas de materiales termofijos, es decir, que una vez formados es imposible fundirlos. Estos materiales tienen propiedades que pueden ser útiles en cierto tipo de piezas y productos. Es obvio que este tipo de materiales no pueden moldearse mediante inyección de polímeros fundidos.

Existen básicamente dos formas de “iniciar” la reacción en un proceso de moldeo por inyección reactiva [Castro et al., 1981]. Si los componentes son altamente reactivos a la temperatura de mezclado –por ejemplo los poliuretanos– la reacción puede iniciarse por el solo hecho de realizar la mezcla. Este fenómeno se conoce como “activación por mezclado”. Por otro lado, si los componentes requieren una temperatura mayor que la de mezclado, para desarrollar una velocidad de reacción apreciable, esto se logra típicamente precalentando el molde o el material reforzante, hasta la temperatura requerida para tener la velocidad de reacción deseada –por ejemplo en el caso de poliésteres y epoxis– [González-Romero y Macosko, 1985]. Como la polimerización es altamente exotérmica, la propia generación de calor de la reacción que se inicia es suficiente para calentar el resto del sistema hasta las temperaturas requeridas. Esto se conoce con el nombre de “activación térmica”.

En ambos tipos de activaciones la reacción comienza desde el momento mismo en que se mezclan los reactivos, y continúa durante el proceso de llenado del molde. Sin embargo, dado que el proceso de llenado puede hacerse muy rápido, en el caso de la activación térmica la conversión que se tiene durante el llenado es prácticamente despreciable y es muy pequeña si se utiliza activación por mezclado. Una vez que se ha llenado el molde se lleva a cabo la parte principal de la reacción, con aumento gradual de la viscosidad del sistema, hasta llegar a su solidificación total. Por tanto, un modelado detallado del moldeo por inyección reactiva podría dividirse en dos partes: la primera parte debería considerar, durante la etapa de llenado del molde, los efectos combinados del flujo, de la reacción y de la transferencia y/o generación de calor asociada a ésta. La segunda parte del modelo debería tener continuidad con la etapa anterior y considerar los efectos convectivos de la transferencia de calor en las paredes del molde, que típicamente están a mayor temperatura que los reactivos al inicio del proceso. Varios autores han trabajado en el desarrollo de estos modelos detallados y en su validación experimental. La etapa de llenado del molde ha sido estudiada, considerando diferentes casos, por Domine y Gogos [1976], Castro y Macosko [1982], González Romero y Macosko [1985], Lekakou y Richardson [1986] y es ampliamente discutida por C. W. Macosko [1989].

La etapa en que se logra la mayoría de la conversión química, hasta llegar a la solidificación final, se conoce como “reacción de curado” o simplemente “curado”. Debido a los efectos inerciales del rápido llenado del molde y la baja viscosidad del sistema, así como a la transferencia de calor a través de las paredes de un molde no adiabático, es posible que, al iniciar el curado, exista todavía movimiento del fluido. Sin embargo, a medida que transcurre la reacción, la viscosidad del fluido aumenta considerablemente, y como ya no existe flujo, puede suponerse que el sistema tiende a permanecer estático. Algunos autores han considerado el efecto convectivo en esta etapa, pero se ha visto que es prácticamente despreciable [Broyer y Macosko, 1978]. Por esta razón, la reacción de curado es también conocida como una “polimerización estática”.

Como se explicará más adelante, la forma común de modelar una polimerización estática involucra la utilización de algún o algunos métodos numéricos para poder resolver el modelo. Sin embargo, no parece haberse realizado comparación alguna entre los diversos métodos numéricos disponibles. El objeto de este trabajo es únicamente la comparación de diversos métodos relacionados con la solución de un modelo para la polimerización estática en el proceso de moldeo por inyección reactiva. No es parte de este trabajo el estudio de los procesos anteriores (mezclado, llenado del molde, etc.) ni los procesos posteriores a la polimerización (desmoldado, etc.).

Modelo Matemático

Modelar una polimerización estática es más simple que considerar efectos convectivos porque, bajo las suposiciones anteriores, no es necesario resolver las ecuaciones de momentum y basta con resolver un balance de energía. En la práctica, el problema se reduce a resolver la ecuación de conducción de calor considerando la existencia de generación interna de calor por efecto de la reacción exotérmica.

Algunas otras consideraciones contribuyen a simplificar aún más el planteamiento del problema, conservando su esencia. Por ejemplo, si se considera que la cavidad del molde en que se lleva a cabo la reacción tiene un espesor mucho más pequeño que su longitud y anchura –como en el caso de una lámina– los flujos de calor serán importantes únicamente a través de su espesor. De esta forma el problema se transforma en la ecuación de conducción de calor unidimensional, con generación interna.

Un balance de energía con las consideraciones antes mencionadas da como resultado que la variación de la energía interna por unidad de volumen respecto del tiempo, en un punto dado del sistema, está determinada por la conducción de calor hacia o desde sus puntos vecinos en la dirección del espesor, x , más la generación interna de calor debido a la reacción. Esto se expresa en la forma siguiente [Welty et al., 1984]:

$$\rho C_p \left(\frac{\partial T}{\partial t} \right) = k \left(\frac{\partial^2 T}{\partial x^2} \right) + \left(\frac{dq}{dt} \right) \quad (1.1)$$

en donde T es la temperatura, t es el tiempo, ρ es la densidad, C_p es la capacidad calorífica, k es la conductividad térmica y q es el calor generado por la reacción por unidad de volumen. La ecuación (1.1) tiene unidades de energía por unidad de volumen y por unidad de tiempo. Para expresarla en términos de cambio de temperatura por unidad de tiempo, se divide entre el factor ρC_p para obtener:

$$\left(\frac{\partial T}{\partial t}\right) = \alpha \left(\frac{\partial^2 T}{\partial x^2}\right) + \frac{1}{\rho C_p} \left(\frac{dq}{dt}\right) \quad (1.2)$$

en donde α es la difusividad térmica. La ecuación (1.2) representa el cambio de temperatura respecto del tiempo en cualquier punto, debido a la conducción y a la generación interna, dados por los dos términos del lado derecho.

Si no existe difusión, la generación interna en un punto dado está íntimamente ligada con el cambio de concentración con respecto al tiempo en ese mismo punto, lo cual se expresa mediante la ecuación:

$$\frac{dq}{dt} = -\Delta H_r \left(\frac{dC}{dt}\right) \quad (1.3)$$

en donde C es la concentración molar del reactivo y ΔH_r es el calor de reacción. Sustituyendo la ecuación (1.3) en la (1.2) se obtiene:

$$\frac{\partial T}{\partial t} = \alpha \left(\frac{\partial^2 T}{\partial x^2}\right) + \beta \left(\frac{dC}{dt}\right) \quad (1.4)$$

en donde β es un factor que describe el efecto térmico por unidad de concentración (ver nomenclatura al final del capítulo).

Para resolver la ecuación (1.4) se requiere una expresión cinética para el segundo término del lado derecho. La velocidad de reacción, dC/dt , en general depende tanto de la temperatura como de la concentración de los reactivos. Aunque desde el punto de vista de los mecanismos de reacción, las reacciones de polimerización suelen ser complejas e involucrar varias reacciones simultáneas (y por ello los parámetros cinéticos son difíciles de determinar), se ha demostrado [Marciano et al., 1980] que en muchos casos la cinética puede ser descrita por la forma empírica usual para una reacción de n -ésimo orden:

$$\frac{dC}{dt} = -k_r C^n \quad (1.5)$$

en donde k_r es la “constante” de velocidad de reacción. La ecuación (1.5) expresa el cambio de concentración con respecto al tiempo en un punto del sistema únicamente en términos de la concentración, mediante el orden de reacción. Como en la ecuación (1.4) la temperatura es variable, se requiere incluir en la ecuación (1.5) una función que describa la velocidad de reacción en términos de la temperatura. La forma usual de hacerlo es considerar que la

constante de velocidad de reacción depende de la temperatura en la forma propuesta por Arrhenius:

$$k_r = A e^{-E_a/RT} \quad (1.6)$$

en donde A es el factor de frecuencia, E_a es la energía de activación de la reacción y R es la constante universal de los gases. Combinando las ecuaciones (1.6) y (1.5) se obtiene la expresión para la velocidad de reacción en función de la temperatura y la concentración:

$$\frac{dC}{dt} = -AC^n e^{-E_a/RT} \quad (1.7)$$

Sustituyendo en la ecuación (1.4) se obtiene la expresión para la distribución espacial y temporal de la temperatura en una polimerización estática:

$$\frac{\partial T}{\partial t} = \alpha \left(\frac{\partial^2 T}{\partial x^2} \right) - A\beta C^n e^{-E_a/RT} \quad (1.8)$$

Esta ecuación y la (1.4) están compuestas de dos partes: el primer término de la derecha, junto con el lado izquierdo, forman una ecuación diferencial parcial de segundo orden con la temperatura como función del tiempo y la distancia. El segundo término de la derecha proviene de un problema de valor inicial en el que, dada una concentración y una temperatura, se puede calcular la rapidez de generación de calor (o de cambio de la temperatura debido a dicha generación). La solución del segundo término, que equivale a integrar la ecuación (1.7), permite calcular también la concentración de reactivo en el dominio espacial, en función del tiempo (ver Capítulo II).

Para resolver la ecuación (1.8) se requiere un conjunto de condiciones iniciales y de frontera. Para ello es necesario complementar la imagen física del modelo. Supóngase que el molde en el que se lleva a cabo la polimerización estática, además de tener un espesor pequeño, está sujeto a unas condiciones de transferencia de calor idénticas en ambas caras del molde, por ejemplo, mediante un flujo turbulento de enfriamiento o calentamiento. Supóngase también que los perfiles iniciales de temperatura y concentración son “planos”, es decir, no son función de la coordenada espacial. Si estos perfiles inicialmente son planos, entonces son simétricos respecto del plano central del molde que divide su espesor en dos partes. Si además las condiciones de transferencia de calor son idénticas en ambas paredes del molde, entonces los perfiles de temperatura y concentración serán simétricos respecto de dicho plano central durante todo el desarrollo de la polimerización. Esto permite plantear la primera condición de frontera para la ecuación (1.8). Para establecer la simetría espacial, la derivada de la temperatura respecto de la coordenada espacial debe ser cero en el centro del molde:

$$\frac{\partial T}{\partial x} = 0 \quad \text{en } x = 0, \quad t > 0 \quad (1.9)$$

Esta condición de frontera permite dividir el dominio espacial del problema en dos partes iguales, resolverlo en una mitad y, por simetría, obtener la solución en la otra mitad del dominio. Véase la figura 1.1.

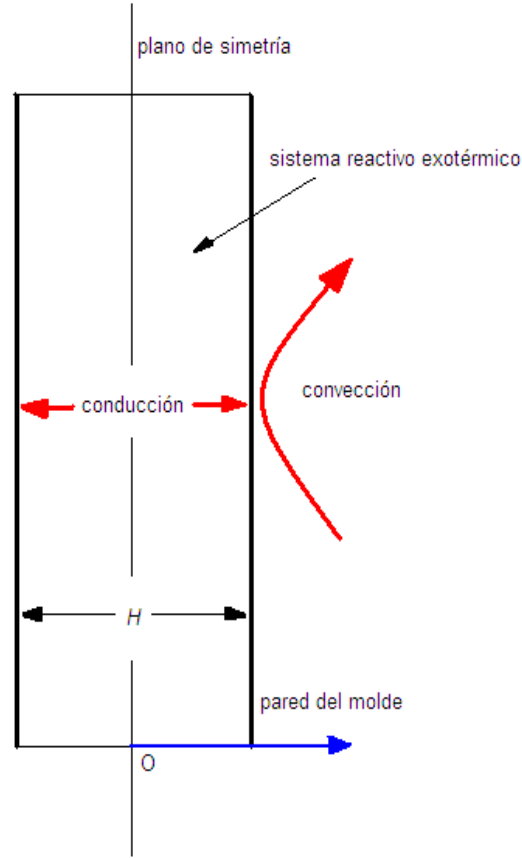


Figura 1.1. Esquema de la geometría y condiciones del modelo

Por otro lado, si el molde está constituido por paredes metálicas delgadas, es posible considerar que la resistencia al flujo de calor en las paredes del molde es despreciable, así como la acumulación de energía térmica en ellas. En estas circunstancias, la transferencia de calor por fuera del molde deberá igualar a la transferencia de calor interna. Si se utiliza un flujo turbulento para la transferencia de calor en la cara exterior de las paredes del molde, la condición se reduce a igualar el calor transferido por conducción en la cara interna de la pared, con el calor transferido por convección en la cara externa:

$$k \left(\frac{\partial T}{\partial x} \right) = U (T_a - T_p) \quad \text{en } x = \frac{H}{2}, \quad t > 0 \quad (1.10)$$

en donde U es el coeficiente global de transferencia de calor por convección, T_a es la temperatura del fluido de transferencia de calor, T_p es la temperatura de la pared del molde y H es el espesor del molde. Algunas veces se ha modelado la polimerización estática empleando la condición de frontera de pared isotérmica. Sin embargo, dada la baja conductividad térmica

de los materiales poliméricos y lo altamente exotérmico de la reacción, es prácticamente imposible mantener la pared del molde a temperatura constante en la realidad. Aunque el modelo se simplificaría aún más, se prefirió plantearlo con la condición de frontera dada por la ecuación (1.10). Lee y Macosko [1980] consideraron que puede haber acumulación de energía térmica en las paredes del molde y modelaron el sistema incluyendo el efecto térmico de las paredes. Aunque esto produce resultados con más sentido físico, en este trabajo se consideró innecesario incluir el efecto de las paredes, dado que su objetivo es únicamente efectuar la comparación de los métodos numéricos.

Por último, las condiciones iniciales consisten simplemente en definir una temperatura y una concentración iniciales, junto con la consideración de que los perfiles iniciales son planos:

$$T = T_0 \quad \text{en} \quad 0 < x < H/2, \quad t = 0 \quad (1.11)$$

$$C = C_0 \quad \text{en} \quad 0 < x < H/2, \quad t = 0 \quad (1.12)$$

El conjunto de ecuaciones (1.8) – (1.12) constituye el modelo simplificado para una polimerización estática considerado en este trabajo. La tabla 1.1 muestra un resumen de las hipótesis implícitas en este modelo, así como algunas otras que no son indispensables, pero que fueron empleadas al resolver las ecuaciones. La hipótesis #13 de la tabla 1.1, por ejemplo, podría eliminarse fácilmente si se incluyeran en el modelo las expresiones para calcular la conductividad, capacidad calorífica, etc., en función de la temperatura y/o la conversión. Sin embargo, se ha encontrado que para muchos sistemas poliméricos estas propiedades cambian poco a medida que avanza la reacción y la suposición de que permanecen constantes es una buena aproximación [Lee y Macosko, 1980].

Tabla 1.1. Hipótesis empleadas en el modelo de la polimerización estática	
1	El espesor es mucho menor que la longitud y la anchura del molde
2	No existe convección interna
3	No existe difusión de los componentes
4	El sistema es homogéneo y bien mezclado
5	La cinética química es de enésimo orden
6	La constante de velocidad de reacción es de tipo Arrhenius
7	La temperatura inicial es constante en todo el dominio espacial
8	La concentración inicial es constante en todo el dominio espacial
9	Las condiciones de transferencia de calor son idénticas en ambas paredes del molde
10	No existe resistencia al flujo de calor en las paredes del molde (o tienen espesor nulo)
11	No existe acumulación de energía térmica en las paredes del molde
12	La transferencia de calor externa se da mediante convección turbulenta
13	La conductividad térmica, la densidad, la capacidad calorífica y el calor de reacción son independientes de la temperatura y del avance de la reacción

Adimensionalización del Modelo

La ecuación (1.8), con las condiciones (1.9) a (1.12) no tiene solución analítica, salvo el caso muy particular que se discute al final del presente capítulo. Esto se debe al término altamente no lineal que describe la generación de calor en una reacción de enésimo orden. De aquí nace la necesidad de emplear métodos numéricos para su solución. Para resolver el modelo, por cualquier método numérico, es conveniente expresarlo en variables adimensionales, que para este caso se definen de la siguiente forma:

$$\text{Temperatura adimensional: } \Theta = \frac{T}{\Delta T_{ad}} \quad (1.13)$$

$$\text{Distancia adimensional: } Z = \frac{x}{H/2} \quad (1.14)$$

$$\text{Tiempo adimensional: } \tau = \left(\frac{4\alpha}{H^2} \right) t \quad (1.15)$$

$$\text{Conversión adimensional: } X = \frac{(C_0 - C)}{C_0} \quad (1.16)$$

$$\text{Energía de activación adimensional: } \gamma = \frac{E_a}{R\Delta T_{ad}} \quad (1.17)$$

Donde ΔT_{ad} es el incremento de temperatura adiabático. La ecuación (1.15) expresa el tiempo adimensionalizado en términos de la conductividad térmica que se encuentra implícita en la difusividad α . Sin embargo, algunos autores han propuesto hacer la adimensionalización del tiempo en términos de la velocidad de reacción, usando:

$$\tau = k_r(T_0) C_0 t$$

(véase, por ejemplo, [Macosko, 1989, p. 143]). Para ciertas aplicaciones esta expresión puede ser más adecuada, sin embargo los resultados obtenidos por cualquiera de las dos formas deben de ser similares.

La sustitución de las definiciones (1.13) a (1.16) en la ecuación (1.8) y en sus condiciones frontera, produce las expresiones adimensionales:

$$\frac{\partial \Theta}{\partial \tau} = \frac{\partial^2 \Theta}{\partial Z^2} + \frac{dX}{d\tau} \quad (1.18a)$$

$$\frac{dX}{d\tau} = Da e^{\gamma \left(1 - \frac{1}{\Theta} \right)} (1 - X)^n \quad (1.18b)$$

y sujetas a las condiciones iniciales y de frontera siguientes:

$$\frac{\partial \Theta}{\partial Z} = 0 \quad \text{en } Z = 0, \quad \tau > 0 \quad (1.19)$$

$$\frac{\partial \Theta}{\partial Z} = Bi (\Theta_a - \Theta_p) \quad \text{en } Z = 1, \quad \tau > 0 \quad (1.20)$$

$$\Theta = \Theta_0 \quad \text{en } 0 < Z < 1, \quad \tau = 0 \quad (1.21)$$

$$X = 0 \quad \text{en } 0 < Z < 1, \quad \tau = 0 \quad (1.22)$$

en donde Da es el número de Damköhler y Bi es el número de Biot (ver nomenclatura al final del capítulo). La solución del sistema (1.18)-(1.22) produce no sólo la temperatura en cualquier punto espacial y en cualquier tiempo, sino que permite también calcular la conversión fraccional, mediante la integración de la ecuación (1.18b). En términos adimensionales, la velocidad de generación de calor es lo mismo que la velocidad de la reacción dada por la ecuación (1.18b).

El número de Damköhler es el cociente entre la rapidez de generación de calor en el sistema y rapidez de transferencia de calor por conducción y está dado por la expresión:

$$Da = \frac{H^2 AC_0^{n-1} \rho C_p}{4k e^{-\gamma}}$$

Cuando el Da es muy grande significa que la generación de calor del sistema es mucho mayor que su capacidad para conducirlo. Un proceso en estas condiciones es esencialmente adiabático. Por otro lado, si el Da es pequeño, la conductividad térmica del sistema permite liberar el calor generado, dependiendo de las condiciones de transferencia de calor en la pared del molde.

El número de Biot que aparece en la ecuación (1.20) puede interpretarse como un coeficiente de transferencia de calor adimensional. Se define como el cociente entre la resistencia del sistema a transferir calor por conducción y la resistencia del medio externo a transferir calor por convección:

$$Bi = \frac{U}{\left(\frac{k}{H/2} \right)}$$

La ecuación (1.20) permite el modelado de una gran variedad de condiciones en la pared, mediante el uso de diversos valores del número de Biot. Un número de Biot igual a cero describe una pared adiabática, es decir, con un coeficiente de transferencia de calor por convección nulo. Si el número de Biot es muy pequeño, la pared es cuasiadiabática, lo que corresponde a un coeficiente global de transferencia de calor muy pequeño comparado con la conducción. Por otro lado, un número de Biot muy grande permite “forzar” la temperatura de la pared en el modelo para que permanezca constante e igual a la temperatura del fluido

exterior de calentamiento o enfriamiento. Otra forma de modelar la pared isotérmica utilizando la condición frontera (1.20) es adaptar el valor de Bi (lo que físicamente correspondería a adaptar el flujo del fluido exterior) y/o adaptar la temperatura del fluido exterior, según el gradiente de temperatura en la pared, para que T_p permanezca constante aunque diferente de T_a .

El modelo adimensional dado por las ecuaciones (1.18)-(1.22) ha sido validado experimentalmente bajo diversas condiciones, y se ha encontrado una buena aproximación entre sus resultados y los datos experimentales. Algunos autores reportan la dificultad de mantener constante la temperatura de la pared del molde durante el curado, por el efecto exotérmico de la reacción [Broyer y Macosko, 1978; Lee y Macosko, 1980]. Esto refuerza la idea de usar la condición de frontera expresada en la ecuación (1.20) en vez de fijar las condiciones de la pared.

Resultados Típicos del Modelo

En esta sección se presentan algunos resultados “típicos” en forma gráfica, con la intención de facilitar la interpretación de las ecuaciones (1.18)-(1.22). Para la obtención de estos resultados se emplearon las propiedades físicas y químicas y las condiciones de moldeo adaptadas de Lee y Macosko [1980], que se encuentran resumidas en la Tabla 1.2:

Tabla 1.2. Propiedades físicas y químicas empleadas en la simulación	
Conductividad térmica,	$k = 0.2510 \text{ J m}^{-1}\text{K}^{-1}\text{s}^{-1}$
Densidad,	$\rho = 1,000 \text{ kg m}^{-3}$
Capacidad calorífica,	$C_p = 1715 \text{ J kg}^{-1}\text{K}^{-1}$
Factor de frecuencia,	$A = 2.56 \times 10^{12} \text{ mol}^{-1}\text{s}^{-1}\text{m}^3$
Energía de activación,	$E_a = 50,200 \text{ J mol}^{-1}$
Orden de reacción,	$n = 2$

La exposición de estos resultados “típicos” se divide en tres partes: 1) comparación de diferentes condiciones de transferencia de calor en la pared, 2) resultados con pared isotérmica a mayor temperatura inicial que los reactivos y 3) resultados con pared isotérmica a la misma temperatura inicial que los reactivos. Los cálculos y las gráficas se obtuvieron con el mismo programa de cómputo con que se realizó la parte central del presente trabajo (cfr. Anexo V).

Las figuras 1.2, 1.3 y 1.4 muestran gráficas de temperatura (en el eje vertical) en función de la distancia (en el eje horizontal) y el tiempo (en el eje inclinado o de profundidad) para diferentes números de Biot en la pared. La figura 1.2 corresponde a $Bi = 0$, es decir, la pared es adiabática. Nótese que, como no existe transferencia de calor en la pared y el perfil de temperaturas inicial es plano, la temperatura varía con el tiempo debido sólo a la generación interna de calor (reacción exotérmica) y no hay variación en el perfil espacialmente. En este caso, que se discute más adelante, la gráfica de la temperatura es similar a la gráfica de la conversión química.

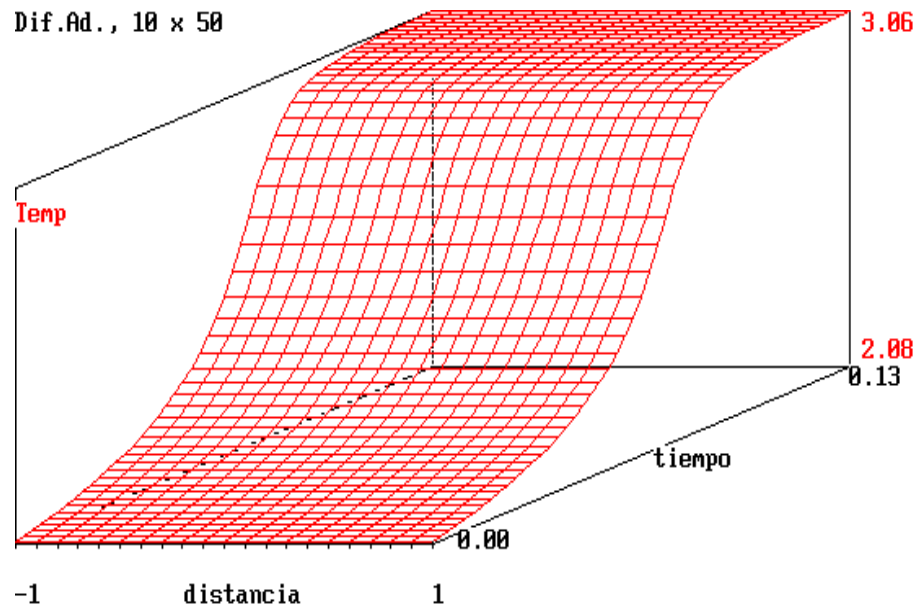


Figura 1.2. Temperatura en función de la distancia y el tiempo en el caso adiabático ($Bi = 0$)

La figura 1.3 muestra la evolución de la temperatura en función del tiempo y del espesor para el caso con $Bi = 5$. Este caso representa una situación física con transferencia de calor en la pared, pero con un coeficiente de transferencia de calor externo de valor moderado. Obsérvese que la temperatura de la pared se incrementa debido a la generación de calor cerca de la pared, pero luego comienza a disminuir debido al efecto del fluido exterior de enfriamiento.

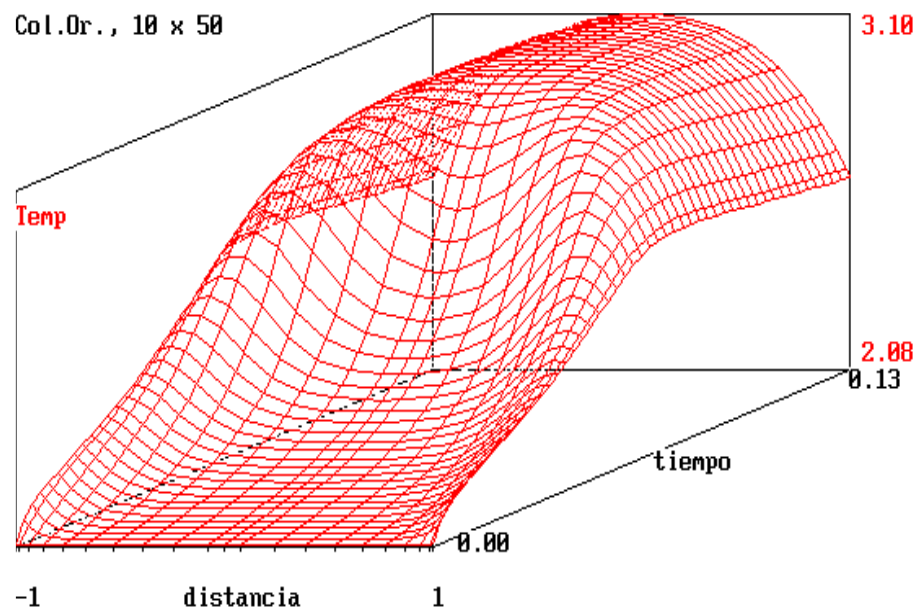


Figura 1.3. Temperatura como función de la distancia y el tiempo en el caso con $Bi = 5$

La figura 1.4 muestra el caso con $Bi = 1000$, lo cual permite modelar el caso con temperatura de la pared prácticamente constante, de acuerdo con lo discutido anteriormente. Equivale a tener un coeficiente de transferencia de calor muy alto, es decir, alta velocidad del fluido de transferencia de calor, de tal modo que mantiene la pared a la temperatura de dicho fluido, suministrando o retirando calor del sistema, según las temperaturas que existan en su interior cerca de la pared. En esta figura se presenta el caso en que la pared se encuentra inicialmente a mayor temperatura que los reactivos, pero una vez que comienza la reacción exotérmica, se mantiene a menor temperatura, como un medio para remover calor y evitar un excesivo sobrecalentamiento. Esto es aproximadamente lo que sucede en el moldeo por inyección reactiva cuando se tiene activación térmica. Las figuras 1.5 y 1.6 ilustran la conversión y la velocidad de reacción como función del espacio y del tiempo para el mismo caso de la figura 1.4. Obsérvese en la figura 1.6 que la reacción se inicia en la pared, debido a su mayor temperatura y, posteriormente, se propaga hacia el interior del molde.

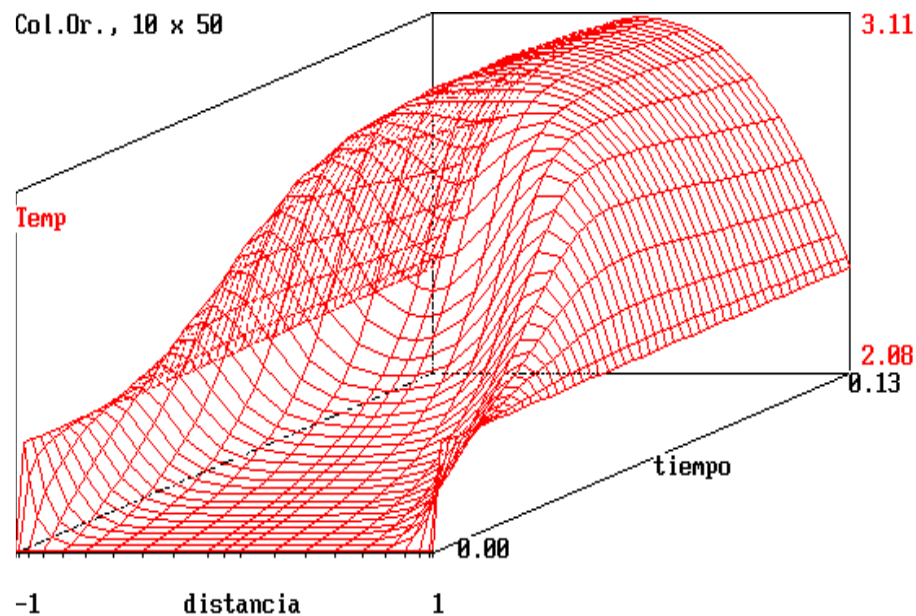


Figura 1.4. Temperatura como función de la distancia y el tiempo en el caso con pared isotérmica y activación térmica

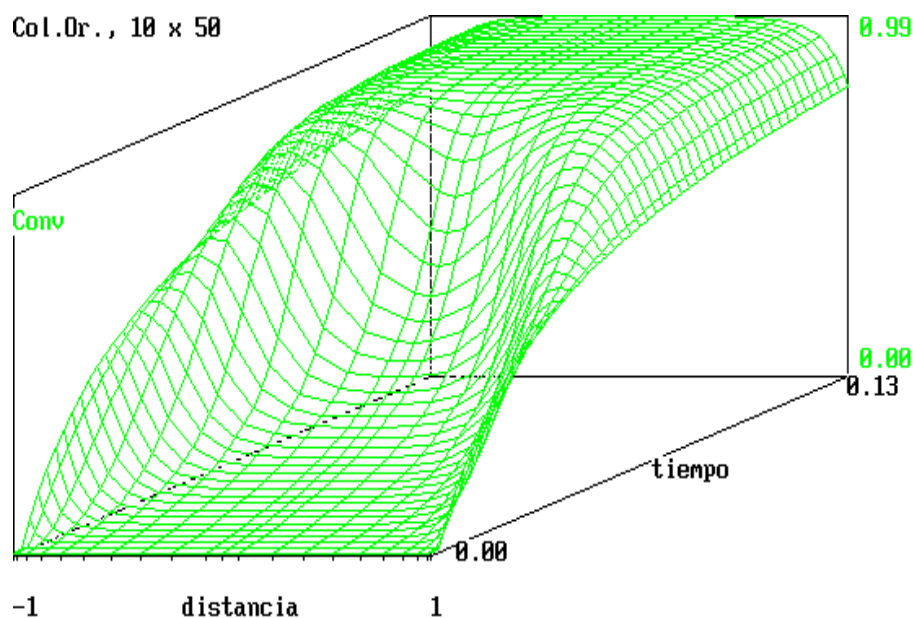


Figura 1.5. Conversión química en función de la distancia y el tiempo en el caso de la figura 1.4

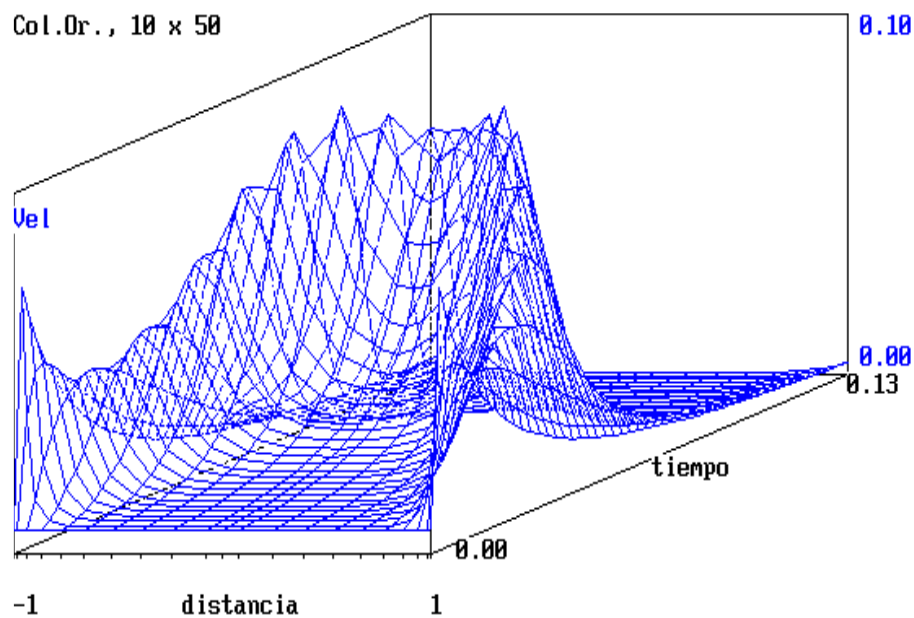


Figura 1.6. Velocidad de reacción (o rapidez de generación de calor) en función de la distancia y el tiempo en el caso de las figuras 1.4 y 1.5

Las figuras 1.7, 1.8 y 1.9 muestran la temperatura, la conversión y la velocidad de reacción respectivamente, para el caso en que la pared es isotérmica a la temperatura inicial del sistema. Esto es aproximadamente lo que se tiene en un sistema activado por mezclado. Nótese las diferencias entre los perfiles de las figuras 1.7 y 1.4, relacionadas con el hecho de que la

reacción se inicia hacia el centro del molde y luego se va propagando hacia las paredes (figura 1.9) a diferencia de lo observado en la figura 1.6.

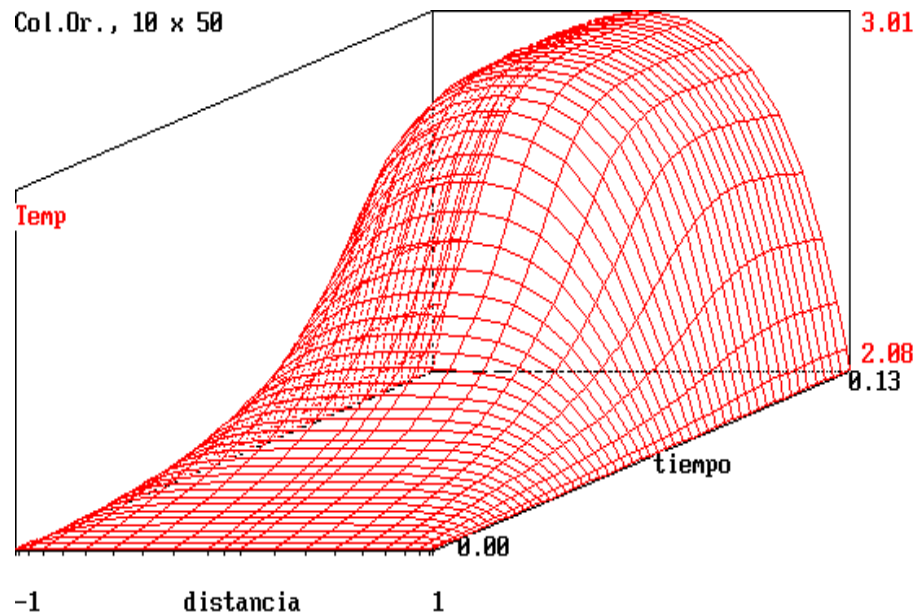


Figura 1.7. Temperatura en función de la distancia y el tiempo en el caso de pared isotérmica y activación por mezclado

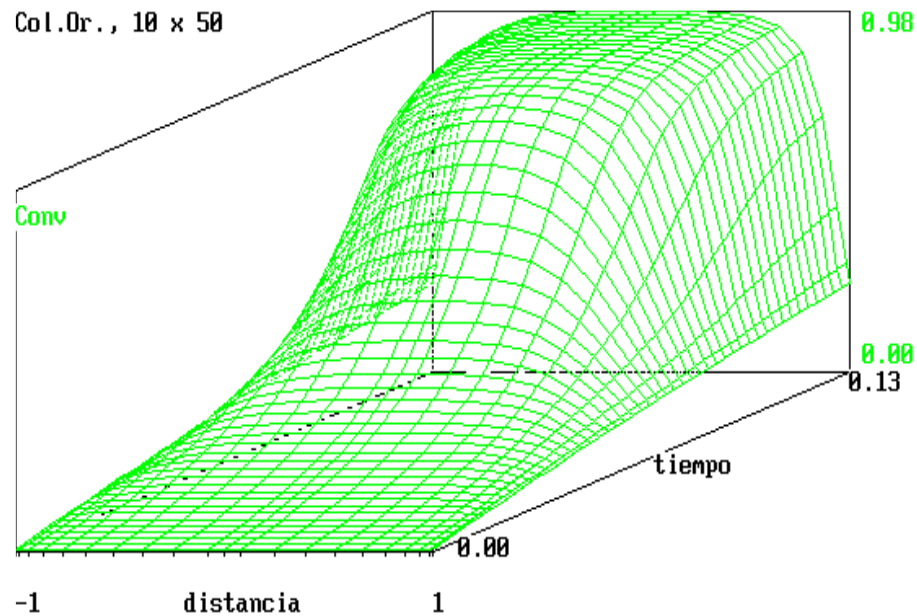


Figura 1.8. Conversión en función de la distancia y el tiempo en el caso de la figura 1.7

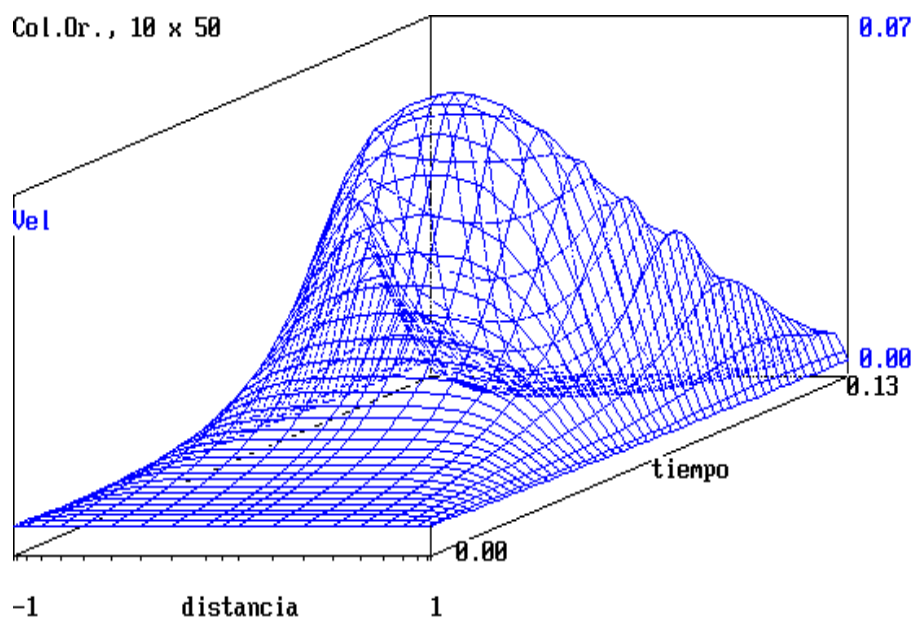


Figura 1.9. Velocidad de reacción (o rapidez de generación de calor) en función de la distancia y el tiempo en el caso de las figuras 1.7 y 1.8

Solución de Algunos Casos Particulares

Se mencionó anteriormente que la ecuación (1.8), junto con sus condiciones de frontera, no tienen una solución analítica general. Por supuesto, tampoco la tienen las ecuaciones (1.18 a y b) que son equivalentes a la (1.8) pero en forma adimensional. Sin embargo, existen algunos casos particulares –que no corresponden a la situación real de una reacción de curado– pero que pueden ser interesantes porque pueden utilizarse para corroborar los resultados encontrados mediante los métodos numéricos.

El primer caso consiste en considerar $Bi = 0$ en la ecuación (1.20), lo cual corresponde físicamente a una pared adiabática y los perfiles iniciales de temperatura y de conversión o avance de la reacción son planos (ecuaciones 1.21 y 1.22). Bajo estas condiciones, en cada punto del sistema la reacción ocurrirá a la misma velocidad, generando la misma cantidad de calor, y los perfiles de temperatura y conversión permanecerán planos. Es decir, no habrá transferencia de calor en la dirección espacial. Esto equivale a decir que la condición $\partial^2 \Theta / \partial Z^2 = 0$ se cumple en todo el dominio espacial y en todo el tiempo. Entonces, la ecuación (1.18a) se reduce a:

$$\frac{\partial \Theta}{\partial \tau} = Da e^{\gamma \left(1 - \frac{1}{\Theta}\right)} (1 - X)^n \quad (1.23)$$

Este es un problema de valor inicial que se resuelve a partir de la condición de temperatura o conversión inicial. Para este caso, en variables adimensionales, se cumple que $d\Theta = dX$, por lo que la ecuación (1.23) se convierte en:

$$\frac{d\Theta}{d\tau} = Da e^{\gamma\left(1-\frac{1}{\Theta}\right)} (1-\Theta)^n \quad (1.24)$$

con la condición inicial de $\Theta = \Theta_0$. Al igual que el caso general, este problema tampoco tiene una solución analítica, por lo que se requiere algún método numérico apropiado para resolverlo. Una solución a este caso es la que se muestra en la figura 1.2.

Otro caso de interés, porque tiene solución analítica, es cuando en la ecuación (1.2) la rapidez de generación de calor por unidad de volumen es constante, es decir, independiente de la temperatura y de la concentración. Esto correspondería, en la ecuación (1.3) a una velocidad de reacción constante. Si esto tuviera un significado en cinética química sería el siguiente: la reacción química es de orden cero porque no depende de la concentración, y su energía de activación es nula, porque no depende de la temperatura. No existen reacciones químicas con estas características y ciertamente no corresponde a ningún caso de una polimerización. Sin embargo, este caso sí tiene significado físico cuando la generación de calor no es de origen químico, por ejemplo en la disipación de calor en un conductor eléctrico. Para el presente trabajo esta solución analítica es útil para compararla con los resultados obtenidos por diferentes métodos numéricos y obtener algún criterio de su confiabilidad. Carslaw y Jaeger [1959] presentan la solución para este caso (es decir, para la ecuación (1.2) con dq/dt constante) con las siguientes condiciones de frontera:

$$T = T_0 \quad \text{en} \quad 0 < x < H/2, \quad t = 0 \quad (1.25)$$

$$\frac{\partial T}{\partial x} = 0 \quad \text{en} \quad x = 0, \quad t > 0 \quad (1.26)$$

$$T = T_0 \quad \text{en} \quad x = H/2, \quad t > 0 \quad (1.27)$$

más las consideraciones $T_0 = 0$ y $dq/dt = A_0 = \text{constante}$. Las condiciones (1.25) y (1.26) son idénticas a las condiciones (1.11) y (1.9), respectivamente. La condición (1.27) impone una temperatura constante en la pared del molde, igual a la temperatura inicial en todo el dominio espacial. Esto constituye otra particularidad respecto del modelo para la polimerización estática manejado en el presente trabajo, cuya condición de frontera en la pared está dada por la ecuación (1.10) en forma mucho más general.

La solución a la ecuación (1.2) con las condiciones de frontera (1.25)-(1.27) está dada por la ecuación (1.28) [Carslaw y Jaeger, 1959]. Nótese que no está expresada en variables adimensionales.

$$T = \frac{A_0 \left(\frac{H}{2}\right)^2}{2k} \left[1 - \frac{x^2}{\left(\frac{H}{2}\right)^2} - \frac{32}{\pi^3} \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(-1)^n}{(2n+1)^3} \cos \frac{(2n+1)\pi x}{H} e^{\frac{-k(2n+1)^2 \pi^2 t}{H^2}} \right] \quad (1.28)$$

Ésta es una solución únicamente para la temperatura y no tiene una solución para la conversión del “reactivo”, como la que se obtiene necesariamente al resolver el modelo general. La figura 1.10 muestra la gráfica de la ecuación (1.28) en forma comparable a las figuras 1.2 a 1.4 y 1.7.

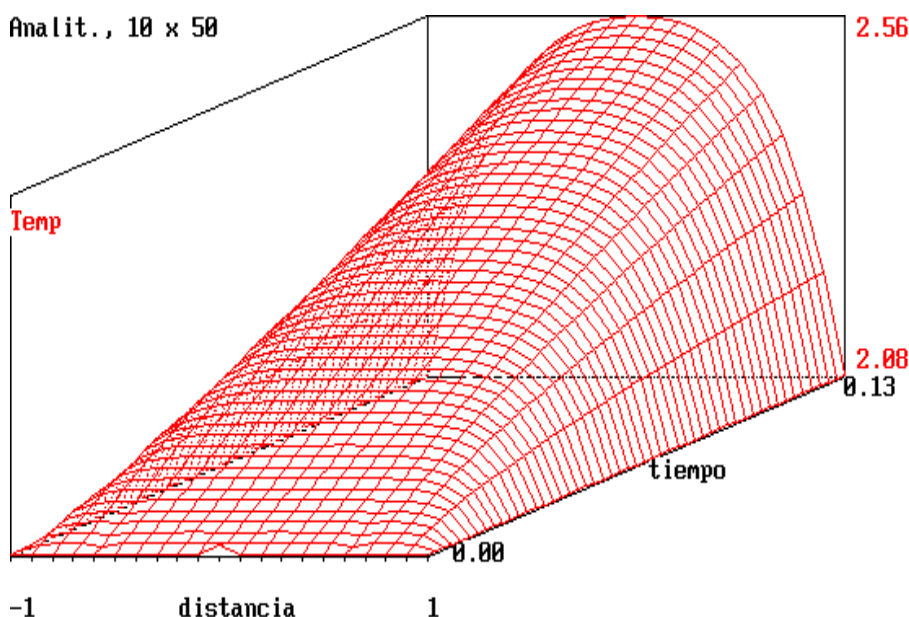


Figura 1.10. Temperatura en función de la distancia y el tiempo en el caso con solución analítica (generación de calor constante, independiente de la distancia y el tiempo)

Nomenclatura del Capítulo I

A	factor de frecuencia, $\text{mol}^{1-n} \text{s}^{-1} \text{m}^{3(n-1)}$
A_0	generación de calor en la ecuación (1.28), $\text{J s}^{-1} \text{m}^{-3}$
Bi	número de Biot = $U(H/2)/k$, adimensional
C	concentración molar del reactivo, mol m^{-3}
C_0	concentración inicial del sistema reactivo, mol m^{-3}
C_p	capacidad calorífica, $\text{J kg}^{-1} \text{K}^{-1}$
Da	número de Damköhler = $(H^2 A C_0^{n-1} \rho C_p) / (4k e^{-\gamma})$, adimensional
E_a	energía de activación de la reacción, J mol^{-1}
H	espesor del molde, m
k	conductividad térmica, $\text{J m}^{-1} \text{K}^{-1} \text{s}^{-1}$
k_r	constante de velocidad de reacción, $\text{mol}^{1-n} \text{s}^{-1} \text{m}^{3(n-1)}$
n	orden de la reacción, adimensional
q	calor generado por la reacción por unidad de volumen, J m^{-3}
R	constante universal de los gases = $8.3144 \text{ J mol}^{-1} \text{K}^{-1}$
T	temperatura, K
T_0	temperatura inicial del sistema reactivo, K
T_a	temperatura del fluido exterior, K

T_p	temperatura de la pared del molde, K
t	tiempo, s
U	coeficiente global de transferencia de calor, $\text{J m}^{-2} \text{s}^{-1} \text{K}^{-1}$
X	conversión adimensional = $(C_0 - C)/C_0$
x	coordenada espacial, m
Z	coordenada espacial adimensional = $x/(H/2)$

Letras griegas:

α	difusividad térmica = $k/(\rho C_p)$, $\text{m}^2 \text{s}^{-1}$
β	= $-\Delta H/(\rho C_p)$, $\text{K m}^3 \text{mol}^{-1}$
γ	energía de activación adimensional = $E_a/(R\Delta T_{ad})$
ΔH_r	entalpía de reacción, J mol^{-1}
ΔT_{ad}	incremento de temperatura adiabático = $\Delta H_r C_0/(\rho C_p)$, K
Θ	temperatura adimensional = $T/\Delta T_{ad}$
τ	tiempo adimensional = $(4\alpha/H^2)t$

Capítulo II

Métodos Numéricos

Mathemata mathematicis scribuntur.

Estrategia General de Solución

Existen varios métodos para resolver numéricamente la ecuación (1.4) y las formas adimensionales asociadas (1.18) que se explican en el Capítulo I. En el presente capítulo se hace una breve exposición de los métodos numéricos que se emplearon para resolver las ecuaciones (1.18) con sus condiciones asociadas (1.19)-(1.22).

Por conveniencia se repiten aquí las ecuaciones (1.18):

$$\frac{\partial \Theta}{\partial \tau} = \frac{\partial^2 \Theta}{\partial Z^2} + \frac{dX}{d\tau} \quad (1.18a)$$

$$\frac{dX}{d\tau} = Da e^{\gamma \left(1 - \frac{1}{\Theta}\right)} (1 - X)^n \quad (1.18b)$$

El lado izquierdo, junto con el primer término del lado derecho de la ecuación (1.18a) constituyen una ecuación diferencial parabólica: la ecuación de conducción de calor. El segundo término es la generación interna cuyo valor está dado por la ecuación (1.18b). Para evaluar la ecuación (1.18b) es necesario conocer la temperatura, Θ , y la conversión, X . Estas variables tienen un valor conocido al comienzo del problema ($\tau = 0$). Conforme transcurre el tiempo, la temperatura cambia por efecto de la conducción y la generación interna (ecuación 1.18a) mientras que la generación interna depende de la temperatura y la conversión, dada por la integral de la generación interna. Por tanto, estrictamente, ambas ecuaciones deberían resolverse simultáneamente. Sin embargo, para el empleo de métodos numéricos, conviene considerar separadamente, en pequeños incrementos, los cambios temporales y espaciales de la temperatura.

Haciendo una expansión de Taylor en el tiempo y despreciando los términos de orden superior, se puede aproximar la primera ecuación por medio de:

$$\frac{\Delta \Theta}{\Delta \tau} \approx \frac{\partial^2 \Theta}{\partial Z^2} + \frac{\Delta X}{\Delta \tau} \quad (2.1)$$

multiplicando por $\Delta \tau$ se puede calcular aproximadamente el incremento de temperatura que sufre cada punto del sistema durante el pequeño intervalo de tiempo $\Delta \tau$:

$$\Delta\Theta \approx \Delta\tau \left(\frac{\partial^2 \Theta}{\partial Z^2} \right) + \frac{\Delta X}{\Delta\tau} \quad (2.2)$$

El valor de ΔX puede encontrarse integrando la ecuación (1.18b) en el pequeño intervalo $\Delta\tau$, considerando constantes la temperatura y la conversión, o estimando cuánto cambian durante el $\Delta\tau$. Si se utiliza algún método para aproximar la derivada $\partial^2 \Theta / \partial Z^2$, entonces es posible encontrar la nueva temperatura en cada punto del sistema mediante la ecuación (2.2). Si la temperatura en un punto en un tiempo dado se denomina como Θ_j , y la temperatura en ese mismo punto pero un tiempo $\Delta\tau$ después se denomina como Θ_{j+1} , entonces:

$$\Theta_{j+1} \approx \Theta_j + \Delta\Theta \quad (2.3)$$

Este es un esquema de diferencias finitas en el tiempo.

En todos los métodos que se comparan en este trabajo se emplea la ecuación (2.3) para “integrar” en el tiempo y un método de Runge-Kutta para integrar la ecuación (1.18b), como se describe más adelante. La comparación es, por tanto, sólo entre los diferentes métodos para aproximar la segunda derivada $\partial^2 \Theta / \partial Z^2$. Para ello se utilizaron los métodos de diferencias finitas, colocación ortogonal y elementos finitos, que se describen a continuación.

Diferencias Finitas

Los métodos de diferencias finitas se basan en una expansión de Taylor para aproximar las derivadas. Si se divide el dominio espacial en un conjunto de subdominios definidos por los nodos equidistantes $0, 1, \dots, N$, y en cada nodo se hace una expansión de Taylor, se tiene:

$$\Theta_{i+1} = \Theta_i + \left(\frac{\partial \Theta}{\partial Z} \right) \Delta Z + \left(\frac{\partial^2 \Theta}{\partial Z^2} \right) \frac{(\Delta Z)^2}{2!} + \dots \quad (2.4)$$

y

$$\Theta_{i-1} = \Theta_i - \left(\frac{\partial \Theta}{\partial Z} \right) \Delta Z + \left(\frac{\partial^2 \Theta}{\partial Z^2} \right) \frac{(\Delta Z)^2}{2!} - \dots \quad (2.5)$$

donde el subíndice i denota el nodo espacial. Sumando estas dos ecuaciones, despejando la segunda derivada y despreciando los términos de orden mayor que dos, se obtiene:

$$\frac{\partial^2 \Theta}{\partial Z^2} \approx \frac{\Theta_{i-1} - 2\Theta_i + \Theta_{i+1}}{(\Delta Z)^2} \quad (2.6)$$

combinando esta ecuación con las ecuaciones (2.1) y (2.3) en la forma adecuada, se obtiene una expresión en diferencias finitas para la ecuación (1.18a)¹:

$$\frac{\Theta_{i,j+1} - \Theta_{i,j}}{\Delta\tau} = \frac{\Theta_{i-1,j} - 2\Theta_{i,j} + \Theta_{i+1,j}}{(\Delta Z)^2} + \left(\frac{\Delta X}{\Delta\tau}\right)_{i,j} \quad (2.7)$$

para $i = 0, 1, \dots, N$; $j = 0, 1, \dots$

Si se supone que para el tiempo j el perfil espacial de temperaturas es conocido, entonces es posible calcular el nuevo perfil de temperaturas un tiempo $\Delta\tau$ después, despejando de la ecuación (2.7):

$$\Theta_{i,j+1} = \Theta_{i,j} + \frac{\Delta\tau(\Theta_{i-1,j} - 2\Theta_{i,j} + \Theta_{i+1,j})}{(\Delta Z)^2} + \Delta X_{i,j} \quad (2.8)$$

Esta forma de resolver el problema se conoce como “diferencias finitas hacia adelante” o “método de Euler”. Tiene la particularidad de ser explícito, porque expresa la nueva temperatura en cada nodo i en términos de las temperaturas conocidas en los nodos vecinos $i-1$ e $i+1$ y de la generación interna de calor en el nodo en cuestión. Por el hecho de ser explícito, este método es rápido y fácil de programar. Sin embargo, se ha demostrado que tiene problemas de convergencia aun sin la generación interna, especialmente si no se cumple que el cociente $\Delta\tau/(\Delta Z)^2 = \delta$ quede dentro del intervalo $0 < \delta < 1/2$. Si se cumple esta condición, el método tiene un error de discretización de orden $O[(\Delta Z)^2]$ y en el caso particular en que $\delta = 1/6$, el error de discretización es de $O[(\Delta Z)^4]$ [Carnahan, 1969, p.433].

Otra forma de escribir la ecuación (2.7) es la siguiente: la segunda derivada se aproxima en el tiempo $j+1$ con lo que se obtiene:

$$\frac{\Theta_{i,j+1} - \Theta_{i,j}}{\Delta\tau} = \frac{\Theta_{i-1,j+1} - 2\Theta_{i,j+1} + \Theta_{i+1,j+1}}{(\Delta Z)^2} + \left(\frac{\Delta X}{\Delta\tau}\right)_{i,j} \quad (2.9)$$

para $i = 0, 1, \dots, N$; $j = 0, 1, \dots$

Este método se conoce como “diferencias finitas hacia atrás” y tiene la característica de ser implícito, porque expresa la segunda derivada en términos de las temperaturas que están por calcularse. La diferencia fundamental entre la ecuación (2.7) y la (2.9) es la siguiente: en diferencias hacia adelante se calcula la nueva temperatura un incremento de tiempo después, con base en las temperaturas del nodo en cuestión y de los nodos vecinos, más la generación interna de calor, evaluados todos en el tiempo actual. En cambio, en diferencias hacia atrás, se calculan las temperaturas en el nodo en cuestión y las de los nodos vecinos, teniendo en cuenta la generación de calor, de forma tal que después del incremento de tiempo el perfil espacial de temperaturas cumpla con la ecuación de calor. Este método produce un error de $O[\Delta\tau + (\Delta Z)^2]$ [Carnahan, 1969, p.441].

¹ Por simplicidad en adelante se utiliza el símbolo “=” en vez de “ $\approx$ ” incluso en los casos en que se trata de aproximaciones.

Otra posibilidad es combinar las ecuaciones (2.7) y (2.9) usando un factor de ponderación para cada una. Sea p el factor de ponderación para diferencias hacia adelante, tal que $0 \leq p \leq 1$. Entonces, el factor de ponderación para diferencias hacia atrás será $(1-p)$. Utilizando el factor $\delta = \Delta\tau/(\Delta Z)^2$ se obtiene la expresión implícita:

$$\Theta_{i,j+1} - \Theta_{i,j} = \delta [p(\Theta_{i-1,j} - 2\Theta_{i,j} + \Theta_{i+1,j}) + (1-p)(\Theta_{i-1,j+1} - 2\Theta_{i,j+1} + \Theta_{i+1,j+1})] + \Delta X_{i,j} \quad (2.10)$$

Las ecuaciones de diferencias hacia adelante y hacia atrás son casos particulares de la ecuación (2.10), con $p = 1$ y $p = 0$ respectivamente, por lo que en adelante se tratará el caso general. Un caso de particular interés se obtiene cuando $p = (1-p) = 1/2$, que se conoce como el método de Crank-Nicolson, cuya estabilidad no depende de δ y tiene un error de discretización de $O[(\Delta\tau)^2 + (\Delta Z)^2]$ [Carnahan, 1969, p.451].

La ecuación (2.10) puede reescribirse en la siguiente forma, dejando las incógnitas, es decir, las variables con subíndice $j+1$ en el lado izquierdo de la ecuación:

$$-(1-p)\delta\Theta_{i-1,j+1} + [1 + 2(1-p)\delta]\Theta_{i,j+1} - (1-p)\delta\Theta_{i+1,j+1} = p\delta\Theta_{i-1,j} + (1-2p\delta)\Theta_{i,j} + p\delta\Theta_{i+1,j} + \Delta X_{i,j} \quad (2.11)$$

En un tiempo dado el lado izquierdo de la ecuación está por calcularse, mientras que el lado derecho es conocido. Esto puede representarse en la forma matricial:

$$\mathbf{A}\boldsymbol{\Theta}_{j+1} = \mathbf{B}\boldsymbol{\Theta}_j + \Delta\mathbf{X}_j \quad (2.12)$$

en donde $\mathbf{A}$ y $\mathbf{B}$ son matrices tridiagonales con elementos dados por:

$$[A_{i,i-1}] = [A_{i,i+1}] = -(1-p)\delta \quad (2.13a)$$

$$[A_{i,i}] = 1 + 2(1-p)\delta \quad (2.13b)$$

$$[B_{i,i-1}] = [B_{i,i+1}] = p\delta \quad (2.14a)$$

$$[B_{i,i}] = 1 - 2p\delta \quad (2.14b)$$

para $i = 2, \dots, N$

Una vez calculados los avances de reacción en el intervalo $\Delta\tau$, utilizando las temperaturas Θ_j en la ecuación (1.18b), el vector $\Delta\mathbf{X}_j$ es conocido. El lado derecho de la ecuación (2.12) se reduce entonces a un vector conocido, $\mathbf{d}$, con elementos:

$$[d_i] = p\delta\Theta_{i-1,j} + (1-2p\delta)\Theta_{i,j} + p\delta\Theta_{i+1,j} + \Delta X_i \quad (2.15)$$

para $i = 2, \dots, N$

y la ecuación (2.12) se escribe en la forma:

$$\mathbf{A}\Theta_{j+1} = \mathbf{d} \quad (2.16)$$

que es un sistema de $N+1$ ecuaciones lineales con $N+1$ incógnitas, fácilmente resoluble por un método adecuado.

Condiciones en las Fronteras en los Métodos de Diferencias Finitas

Para resolver específicamente el sistema (1.18)-(1.22) es necesario completar la matriz $\mathbf{A}$ y el vector $\mathbf{d}$ de la expresión anterior, para que aproxime adecuadamente las condiciones de frontera. Esto se realiza de la siguiente forma:

Usando la ecuación (2.10) en el centro del molde ($i = 0$) se tiene:

$$\Theta_{0,j+1} - \Theta_{0,j} = \delta [p(\Theta_{-1,j} - 2\Theta_{0,j} + \Theta_{1,j}) + (1-p)(\Theta_{-1,j+1} - 2\Theta_{0,j+1} + \Theta_{1,j+1})] + \Delta X_{0,j} \quad (2.17)$$

El nodo hipotético $i = -1$ queda fuera del dominio del problema, pero la condición de simetría alrededor de $Z = 0$ (ecuación 1.19) permite hacer la sustitución:

$$\Theta_{-1,j} = \Theta_{1,j} \quad (2.18)$$

con lo cual se obtiene:

$$[1 + 2(1-p)\delta]\Theta_{0,j+1} - 2(1-p)\delta\Theta_{1,j+1} = (1-2p\delta)\Theta_{0,j} + 2p\delta\Theta_{1,j} + \Delta X_{0,j} \quad (2.19)$$

Esta ecuación se utiliza para añadir elementos a la matriz $\mathbf{A}$ y el vector $\mathbf{d}$. Así, el primer renglón de la matriz $\mathbf{A}$ tendrá elementos:

$$A_{1,1} = 1 + 2(1-p)\delta \quad \text{y} \quad A_{1,2} = -2(1-p)\delta \quad (2.20)$$

y el primer elemento del vector $\mathbf{d}$ será:

$$d_1 = (1-2p\delta)\Theta_{0,j} + 2p\delta\Theta_{1,j} + \Delta X_{0,j} \quad (2.21)$$

La condición de frontera en la pared del molde puede obtenerse expresando la ecuación (1.20) en diferencias finitas hacia adelante y hacia atrás y promediando con el factor de ponderación p . Las expresiones que se emplearon en este trabajo fueron las siguientes:

$$\left(\frac{\partial \Theta}{\partial Z} \right)_p = \frac{\Theta_N - \Theta_{N-1}}{\Delta Z} \quad (2.22)$$

$$Bi(\Theta_a - \Theta_p) = Bi(\Theta_a - \Theta_N) \quad (2.23)$$

donde el subíndice p significa que la propiedad se evalúa en la pared. El nodo N es el que se localiza en la pared. Combinando estas expresiones y teniendo en cuenta la generación de calor en la cercanía de la pared se llega a la ecuación que describe el incremento de la temperatura en la pared:

$$\begin{aligned}
& -(1-p)\delta\Theta_{N-1,j+1} + [1+(1-p)\delta + (1-p)\delta Bi\Delta Z]\Theta_{N,j+1} = \\
& p\delta\Theta_{N-1,j} + [1-p\delta - p\delta Bi\Delta Z]\Theta_{N,j} + \delta Bi\Delta Z \Theta_a + \Delta X_{N,j}
\end{aligned} \tag{2.24}$$

Con esta expresión se completan la matriz $\mathbf{A}$ y el vector $\mathbf{d}$ de la ecuación (2.16) mediante los elementos:

$$A_{N+1,N} = -(1-p)\delta \tag{2.25a}$$

$$A_{N+1,N+1} = 1 + (1-p)\delta(1 + Bi\Delta Z) \tag{2.25b}$$

$$d_{N+1} = p\delta\Theta_{N-1,j} + [1-p\delta(1 + Bi\Delta Z)]\Theta_{N,j} + \delta Bi\Delta Z \Theta_a + \Delta X_{N,j} \tag{2.25c}$$

Los métodos de diferencias finitas permiten también utilizar malla variable, es decir, usar más nodos donde sea necesario, por ejemplo, donde los gradientes térmicos sean mayores. También es posible utilizar paso variable en el tiempo, de manera que los cambios de temperatura nunca excedan cierto límite en los nodos. Sin embargo, esto complica apreciablemente la formulación matricial del problema. Para fines de comparación de los diferentes métodos se decidió utilizar la forma clásica en la que permanecen constantes los incrementos en el tiempo y en el espacio.

Residuos Ponderados

Existen algunos planteamientos alternos al de diferencias finitas para resolver la ecuación (1.18). En general, excepto en diferencias finitas, los métodos utilizados para resolver la derivada temporal difieren de los empleados para la derivada espacial. Por ejemplo, es común la utilización de un método de Euler modificado, o uno de Runge-Kutta, para la derivada temporal, mientras se utiliza colocación o elementos finitos para la segunda derivada espacial.

A continuación se presentan los conceptos generales relativos al método de los residuos ponderados, para luego aplicarlos concretamente a la solución de la ecuación (1.18), mediante colocación ortogonal y elementos finitos, en la forma como se realizó en el presente trabajo.

Considérese una ecuación diferencial con valores en la frontera de la forma:

$$L(u) = f \tag{2.26}$$

en donde L es un operador diferencial, y u y f son funciones de la variable independiente, digamos x . Supóngase que el dominio del problema está normalizado en el intervalo $[0,1]$ y que se tiene la cantidad necesaria de condiciones de frontera en $x = 0$ y $x = 1$. Existen métodos de aproximación en los cuales se propone una solución para la ecuación diferencial, que son de la forma:

$$v(x) = \sum_{i=1}^N c_i P_{i-1}(x) \tag{2.27}$$

donde v es la solución aproximada, $P_{i-1}(x)$ es un polinomio previamente determinado, de grado $i-1$ en x , y c_i es una constante asociada con cada polinomio, cuyo valor se determina mediante el método numérico en cuestión. El uso de polinomios para aproximar la solución es deseable, porque en general el manejo de funciones algebraicas es más simple que el manejo de funciones trascendentes.

Si se conociera la solución exacta de la ecuación (2.26) se cumpliría la ecuación $L(u)-f = 0$. Sin embargo, dado que v por su naturaleza polinómica es sólo una aproximación a u , la sustitución de v en la ecuación diferencial (2.26) produciría un valor probablemente diferente de cero. Esta cantidad se define como el residuo:

$$R(x) = L(v) - f \quad (2.28)$$

El residuo $R(x)$ es, por tanto, una forma de medir la discrepancia que existe entre la solución exacta, $u(x)$, en general desconocida, y la solución aproximada $v(x)$. Un método para resolver la ecuación (2.26) mediante la aproximación (2.27) probablemente debería tratar de encontrar los valores de las constantes c_i tales que minimizaran el residuo en todo el dominio del problema. En el método denominado “residuos ponderados” se propone hacer cero el residuo en un tipo de promedio mediante una integral en todo el dominio. Si dicho dominio se encuentra normalizado en el intervalo $[0,1]$, la ecuación fundamental del método es:

$$\int_0^1 W(x) R(x) dx = 0 \quad (2.29)$$

En donde las funciones $W(x)$ son factores de ponderación que permiten dar generalidad al método. El significado del término “residuos ponderados” es obvio a partir de la ecuación (2.29). Existen varios métodos particulares, que se caracterizan por la forma como se definen los factores de peso $W(x)$. La definición de estos factores permite plantear varias ecuaciones independientes, de la forma (2.29) para con ellas determinar los parámetros c_i de la ecuación (2.27). Dos de estos métodos, de interés en el presente trabajo son el método de colocación y el método de Galerkin.

Colocación Ortogonal

En el método de colocación los factores de peso se toman como deltas de Dirac, es decir, toman un valor infinito si se evalúan en ciertos puntos predefinidos –los puntos de colocación x_i – y cero si se evalúan en cualquier otro punto [Ames, 1977, p.322; Villadsen y Michelsen, 1978, p.78]. Por tanto, en el método de colocación se tiene:

$$W(x) = \delta(x - x_i) \quad (2.30)$$

La sustitución de la ecuación (2.30) en la (2.29) da como resultado que el residuo sea cero en los puntos de colocación:

$$R(x_i) = 0 \quad i = 1, \dots, N \quad (2.31)$$

En este método los puntos de colocación se escogen arbitrariamente. Si se escogen N puntos de colocación, es posible formular N ecuaciones del tipo de la (2.31) que permiten evaluar N valores de c_i de la ecuación (2.27). A medida que se tiene un mayor número de puntos de colocación, la solución es más exacta en un mayor número de puntos en el dominio. Sin embargo, el residuo puede ser muy diferente de cero en los puntos que no son los de colocación. Se sabe que el método de colocación, como se ha expuesto hasta ahora, no da buenos resultados para problemas del tipo que nos ocupa, en comparación con otros métodos [Villadsen y Michelsen, 1978, p.85]. Sin embargo, nótese que en general la ecuación (2.31), que no tiene integrales e implica sólo la evaluación del residuo (es decir, la evaluación de un polinomio más la función $f(x)$), es mucho más simple que la (2.29) y, por tanto, este método es relativamente fácil de programar.

En el otro método de residuos ponderados que se ha mencionado, el de Galerkin, se consideran como factores de ponderación las funciones base que se utilizan en la expansión polinómica [Ames, 1977; Villadsen y Michelsen, 1978]. Por tanto, en el método de Galerkin:

$$W_i(x) = \frac{\partial v}{\partial c_i} = P_i(x) \quad (2.32)$$

Sustituyendo la ecuación (2.32) en la (2.29) se obtiene la expresión:

$$\int_0^1 P_{i-1}(x) R(x) dx = 0 \quad i = 1, \dots, N \quad (2.33)$$

con lo cual se obtienen tantas ecuaciones independientes del tipo (2.33) como constantes c_i se tengan por determinar. Las integrales de esta ecuación no siempre se efectúan fácilmente en forma analítica. Un punto “en contra” del método de Galerkin, respecto del de colocación, es esta dificultad. Sin embargo, para problemas del tipo abordado en el presente trabajo, el método de Galerkin ha probado ser muy efectivo en la minimización del residuo [Villadsen y Michelsen, 1978, p.85]. De aquí la conveniencia de usar este método.

Una forma de solucionar el problema de la integral analítica es aproximarla numéricamente mediante cuadraturas. Una cuadratura es una sumatoria de la función $F(x)$ que se quiere integrar, evaluada en ciertos puntos x_j y multiplicada por ciertos factores de ponderación apropiados, w_j :

$$\int_0^1 W(x) F(x) dx \approx \sum_{j=1}^M w_j F(x_j) \quad (2.34)$$

en donde M es el número de puntos utilizados en la cuadratura para aproximar la integral.

La adaptación de la ecuación (2.33) a la (2.34) produce la expresión:

$$\int_0^1 P_{i-1}(x) R(x) dx \approx \sum_{j=1}^M w_j R(x_j) = 0 \quad i = 1, \dots, N \quad (2.35)$$

Se ha demostrado que si $P_i(x)$, o $W(x)$ en la ecuación (2.34), tiene la forma $x^\alpha(1-x)^\beta$, es decir, tiene al menos una raíz en $x = 0$ y/o $x = 1$, entonces los puntos óptimos para las cuadraturas son las raíces del polinomio de Jacobi de grado M , asociado con los valores de α y β . Estos

polinomios tienen todas sus raíces reales, distintas y en el intervalo $[0, 1]$. Por otro lado, todos los factores de peso w_j en la cuadratura son mayores que cero [Villadsen y Michelsen, p.115].

Si el número de nodos en la cuadratura, M , es igual al número de incógnitas por determinarse, c_i , es decir, $M = N$, entonces, como todos los factores de peso son mayores que cero, la única forma de que se cumpla la igualdad del lado derecho de la ecuación (2.35) es que se cumpla también la siguiente condición:

$$R(x_j) = 0 \quad j = 1, \dots, N \quad (2.36)$$

Esta ecuación es idéntica a la (2.31) que se dedujo para el método de colocación, excepto que los puntos de colocación, en vez de ser arbitrarios, son las raíces del polinomio de Jacobi asociado con el problema. De esta forma se llega a un método que combina las siguientes ventajas: a) tiene la simplicidad práctica del método de colocación, mientras que b) conserva muy aproximadamente la exactitud del método de Galerkin. Como los polinomios de Jacobi cumplen una relación de ortogonalidad, este método recibe el nombre de “colocación ortogonal”. Ha sido utilizado exitosamente para la solución de una variedad de problemas de ingeniería química, incluyendo ecuaciones no lineales [Ferguson y Finlayson, 1970; Finlayson, 1974].

Una de las ventajas que presenta el método de colocación ortogonal es que las condiciones de frontera pueden ser incluidas en el polinomio que se utiliza para obtener la solución. Esto hace que el “trabajo” de cálculo se centre en la obtención de los coeficientes de los polinomios para que aproximen la solución dentro del dominio, sabiendo que automáticamente cumplirán las condiciones de frontera. Por ejemplo, la condición de frontera (1.19) $\partial\Theta/\partial Z = 0$, puede “interconstruirse” en un polinomio de grado par en Z . Es decir, cualquier polinomio de grado par en Z tiene pendiente cero en $Z = 0$ y, por tanto, cumple automáticamente dicha condición de frontera. Por esta razón, en el presente trabajo se utilizan polinomios de grado par, simbolizados por $P_i(Z^2)$.

Otra de las características de la colocación ortogonal es que permite resolver el problema en términos de la variable dependiente evaluada en los puntos de colocación, en vez de tener que evaluar los coeficientes c_i de la ecuación (2.27). Esto se hace de la siguiente forma [Finlayson, 1980; adaptado de p.76 y ss.]: la solución aproximada está dada por la ecuación (2.27) en forma general. Para trabajar con polinomios del tipo que se utilizan en el presente trabajo, se toma en cuenta la condición de frontera $du/dx = 0$ en $x = 0$. Por tanto, se usarán polinomios de grado par. Para incluir la condición de frontera en $x = 1$, se requiere añadir el factor $(1-x^2)$ para que una raíz quede en $x = 1$. De esta forma se tiene:

$$v(x^2) = (1-x^2) \sum_{i=1}^N c_i P_{i-1}(x^2) \quad (2.37)$$

esta expresión puede escribirse también en la forma más simple:

$$v(x^2) = \sum_{i=1}^{N+1} d_i x^{2i-2} \quad (2.38)$$

En esta ecuación son desconocidas las $N+1$ constantes d_i y el valor de $v(x^2)$. Sin embargo, si se evalúa la expresión en los $N+1$ puntos de colocación (las raíces del polinomio de Jacobi de grado $N+1$), pueden plantearse las $N+1$ ecuaciones:

$$v(x_j^2) = \sum_{i=1}^{N+1} d_i x_j^{2i-2} \quad j = 1, \dots, N+1 \quad (2.39)$$

Esta ecuación puede expresarse en notación matricial en la forma:

$$\mathbf{v} = \mathbf{Q}\mathbf{d} \quad (2.40)$$

en donde $\mathbf{v}$ es el vector de soluciones aproximadas en los puntos de colocación; $\mathbf{Q}$ es una matriz de $N+1 \times N+1$ con elementos $Q_{j,i} = x_j^{2i-2}$ y $\mathbf{d}$ es el vector de coeficientes por determinarse. La ecuación (2.40) sigue teniendo más incógnitas de las que es posible determinar. Sin embargo, es posible evaluar las derivadas en los puntos de colocación y, mediante ecuaciones similares a la (2.39) para las derivadas, obtener las ecuaciones:

$$\frac{d\mathbf{v}}{dx} = \mathbf{C}\mathbf{d} \quad (2.41)$$

$$\frac{d^2\mathbf{v}}{dx^2} = \mathbf{D}\mathbf{d} \quad (2.42)$$

en donde la matriz $\mathbf{C}$ tiene elementos $C_{j,i} = (2i-2)x_j^{2i-3}$, la matriz $\mathbf{D}$ tiene elementos $D_{j,i} = (2i-3)(2i-2)x_j^{2i-4}$ y los elementos de los vectores $d\mathbf{v}/dx$ y $d^2\mathbf{v}/dx^2$ son las derivadas correspondientes evaluadas en los puntos de colocación.

Las expresiones matriciales (2.40) a (2.42) representan $3(N+1)$ ecuaciones en $4(N+1)$ incógnitas. Las incógnitas son $N+1$ valores de d_i , $N+1$ valores de v_i y $N+1$ valores de cada una de las derivadas evaluadas en los puntos de colocación. Para poder resolverlas, se combinan con la ecuación diferencial evaluada en los $N+1$ puntos de colocación, con lo que se tienen otras $N+1$ ecuaciones para resolver el sistema.

En la práctica esto se hace de la siguiente forma: como lo que se quiere obtener son los valores de $v(x)$ y no el vector $\mathbf{d}$, de la ecuación (2.40) se puede despejar:

$$\mathbf{d} = \mathbf{Q}^{-1}\mathbf{v} \quad (2.43)$$

y sustituir en las ecuaciones (2.41) y (2.42) para obtener:

$$\frac{d\mathbf{v}}{dx} = \mathbf{C}\mathbf{Q}^{-1}\mathbf{v} = \mathbf{A}\mathbf{v} \quad (2.44)$$

$$\frac{d^2\mathbf{v}}{dx^2} = \mathbf{D}\mathbf{Q}^{-1}\mathbf{v} = \mathbf{B}\mathbf{v} \quad (2.45)$$

El operador diferencial, L , de la ecuación (2.26) suele ser una combinación de los operadores 1, d/dx y d^2/dx^2 operando sobre $u(x)$. En caso de existir derivadas de mayor orden, el

procedimiento anterior puede extenderse cuanto sea necesario. Entonces, las ecuaciones (2.44) y (2.45) se sustituyen en la ecuación diferencial en la forma que dicte el operador L , con lo cual se obtiene un sistema de $N+1$ ecuaciones en $N+1$ incógnitas, v_i , que son la solución a la ecuación diferencial en los puntos de colocación:

$$\mathbf{L}\mathbf{v} = \mathbf{f} \quad (2.46)$$

En esta ecuación la matriz $\mathbf{L}$ está compuesta por los elementos necesarios de las matrices $\mathbf{A}$ y $\mathbf{B}$ de las ecuaciones (2.44) y (2.45) y el vector $\mathbf{f}$ tiene elementos $f(x_j)$, es decir, es la función $f(x)$ de la ecuación (2.26) evaluada en los puntos de colocación. Si después de resolver el sistema (2.46) se requieren los resultados en puntos diferentes de los de colocación, es posible obtenerla mediante el uso de la ecuación (2.43) para calcular el vector $\mathbf{d}$, dado que $\mathbf{v}$ ya es conocido y, posteriormente, se sustituye en la ecuación (2.39), junto con los valores de x en los cuales se desee calcular la solución aproximada.

La matriz $\mathbf{L}$ generalmente no tiene elementos diferentes de cero ni es simétrica y puede tener elementos de muy diversa magnitud. Por esta razón conviene utilizar un método de eliminación gaussiana con pivoteo parcial para la solución del sistema (2.46).

Colocación Ortogonal en la Ecuación de Calor

Aunque existen métodos de colocación ortogonal para problemas de valores iniciales, el método descrito en la sección anterior se aplica estrictamente a problemas de valores en las fronteras. Sin embargo, es posible adaptarlo para resolver la ecuación de calor con generación interna, haciendo una combinación con algún método para integrar en el tiempo, como se mencionó al principio de este capítulo.

Volviendo a la ecuación (2.1) que es la que se quiere resolver, se tiene:

$$\frac{\Delta\Theta}{\Delta\tau} \approx \frac{\partial^2\Theta}{\partial Z^2} + \frac{\Delta X}{\Delta\tau} \quad (2.1)$$

Expresando la cantidad $\Delta\Theta$ en la forma $\Delta\Theta = \Theta_j - \Theta_{j-1}$, en donde el subíndice j se refiere al nodo temporal, la expresión anterior puede escribirse en la forma:

$$\frac{\Theta_j - \Theta_{j-1}}{\Delta\tau} = \frac{\partial^2\Theta}{\partial Z^2} + \frac{\Delta X}{\Delta\tau} \quad (2.47)$$

y reacomodando,

$$-\Delta\tau \left(\frac{\partial^2\Theta}{\partial Z^2} \right)_j + \Theta_j = \Theta_{j-1} + \Delta X_{j-1} \quad (2.48)$$

la cual expresa el perfil espacial de temperaturas en el tiempo actual j , en función de las temperaturas en el tiempo anterior, $j-1$ y de la generación de calor correspondiente a ese intervalo de tiempo. La expresión (2.48) tiene la forma de la ecuación (2.26), $L(\Theta) = f$, considerando:

$$L \equiv -\Delta\tau \left(\frac{\partial^2}{\partial Z^2} \right) + 1 \quad (2.49)$$

y

$$f \equiv \Theta_{j-1} + \Delta X_{j-1} \quad (2.50)$$

Utilizando la ecuación (2.45) en la (2.49) y ésta en la (2.48), se llega a la expresión matricial:

$$(\mathbf{I} - \Delta\tau \mathbf{B}) \Theta_j = \Theta_{j-1} + \Delta \mathbf{X}_{j-1} \quad (2.51)$$

en donde $\mathbf{I}$ es la matriz identidad y los elementos Θ_j de los vectores corresponden a las temperaturas evaluadas en los puntos de colocación. Una vez que se tiene la matriz $\mathbf{B}$ de la ecuación (2.45) es posible obtener la matriz $\mathbf{L}$ (de la 2.46) para el problema formulado en la ecuación (2.1), que tendrá elementos de la siguiente forma:

$$L_{i,j} = -\Delta\tau B_{i,j} \quad i \neq j \quad (2.52a)$$

$$L_{i,i} = 1 - \Delta\tau B_{i,i} \quad i, j = 1, \dots, N+1 \quad (2.52b)$$

Por otro lado, el vector $\mathbf{f}$ correspondiente a la ecuación (2.46) tendrá elementos de la forma:

$$f_i = [\Theta_{i,j-1} + \Delta X_{i,j-1}] \quad i = 1, \dots, N+1 \quad (2.52c)$$

donde el subíndice $j-1$ representa la evaluación de las propiedades en el nodo temporal inmediatamente anterior.

Condiciones en las Fronteras en el Método de Colocación Ortogonal

Como se mencionó anteriormente, la condición de frontera en el centro del molde, $\partial\Theta/\partial Z = 0$ puede incluirse en el tipo de polinomios que se utilicen en la colocación. El uso de un polinomio de grado par en Z garantiza el cumplimiento de dicha condición. La condición en $Z = 1$ es $\partial\Theta/\partial Z = Bi(\Theta_a - \Theta_{N+1})$. Esta ecuación puede escribirse en la forma:

$$\left(\frac{\partial\Theta}{\partial Z} \right)_{Z=1} + Bi\Theta_{N+1} = Bi\Theta_a \quad (2.53)$$

Debido al uso del factor $(1-x^2)$ en la ecuación (2.37), que será $(1-Z^2)$ en este caso, $Z = 1$ corresponde al punto de colocación $N+1$. Por otro lado, la ecuación (2.44) relaciona la primera derivada espacial con las temperaturas en los puntos de colocación en todo el dominio espacial. La matriz $\mathbf{A}$ en dicha ecuación, operando sobre las temperaturas en los nodos, produce los valores de las derivadas en cada nodo. Tomando únicamente la ecuación $N+1$ del sistema representado por la expresión (2.44), que es la que produce la derivada en el nodo $Z=1$, se tiene:

$$\left(\frac{\partial\Theta}{\partial Z} \right)_{N+1} = A_{N+1,1}\Theta_1 + A_{N+1,2}\Theta_2 + \dots + A_{N+1,N+1}\Theta_{N+1} \quad (2.54)$$

Sustituyendo el valor de $\partial\Theta/\partial Z$ dado por esta ecuación en el primer término de la ecuación (2.53) se obtiene:

$$A_{N+1,1}\Theta_1 + A_{N+1,2}\Theta_2 + \dots + (A_{N+1,N+1} + Bi)\Theta_{N+1} = Bi\Theta_a \quad (2.55)$$

Para hacer que se cumpla la condición de frontera en $Z = 1$ la ecuación (2.55) sustituye a la ecuación $N+1$ del sistema expresado por la ecuación (2.51). Por tanto, el renglón $N+1$ de la matriz **L** para el sistema en cuestión tendrá los elementos:

$$L_{N+1,i} = A_{N+1,i} \quad i = 1, \dots, N \quad (2.56a)$$

$$L_{N+1,N+1} = A_{N+1,N+1} + Bi \quad (2.56b)$$

Estos elementos sustituyen al renglón $i = N+1$ de la expresión (2.52b). Además el lado derecho de la ecuación (2.55) corresponde al elemento $N+1$ del vector **f** dado por la ecuación (2.52c):

$$f_{N+1} = Bi\Theta_a \quad (2.57)$$

Por tanto, esta expresión se sustituye en el elemento $N+1$ de la expresión (2.52c).

Generación de las Matrices **A** y **B** para Colocación Ortogonal

Las ecuaciones (2.44) y (2.45) definen las matrices **A** y **B** requeridas para construir la matriz **L**. Lo único que se requiere para construir ambas matrices son las raíces del polinomio de Jacobi de grado $2N$, multiplicado por el factor $(1-Z^2)$, para resolver el problema con N puntos de colocación interiores, más la pared.

Los polinomios de Jacobi pueden deducirse de la relación de ortogonalidad que los define, o de la ecuación siguiente [Villadsen y Stewart, 1967]:

$$P_i(Z^2) = F\left(-1, i + \frac{3}{2}, \frac{1}{2}, Z^2\right) \quad (2.58)$$

en donde F representa la función hipergeométrica². La tabla A.1.1 del Anexo I contiene los coeficientes de los polinomios que se utilizaron, de acuerdo con la forma siguiente:

$$P_i(Z^2) = (1 - Z^2)(1 - bZ^2 + cZ^4 - dZ^6 + \dots \quad (2.59)$$

Nótese que el primer término siempre es 1 y que los signos de los demás términos se van alternando.

Para generar las matrices **Q**, **Q⁻¹**, **C** y **D**, necesarias para calcular **A** y **B**, así como para generar estas últimas, se usó el programa que se encuentra en el Anexo II. Este programa fue escrito en Turbo Basic[®]. Los elementos necesarios de estas matrices se encuentran como datos

² Para una explicación de la función hipergeométrica y la nomenclatura, véase por ejemplo Kreyszyg, [1977].

(“data”) en el programa principal, POLICOMP.BAS, en el Anexo III, dentro de la subrutina de colocación ortogonal.

Elementos Finitos

El método de elementos finitos es otro de los casos particulares del método de los residuos ponderados. Se presenta primero una exposición de conceptos generales y después se formula el problema particular objeto del presente trabajo.

En el método de elementos finitos se obtiene una solución aproximada del problema de valores en la frontera $L(u) = f$, mediante una serie de funciones conocidas, predeterminadas, Φ_i , multiplicadas por constantes a determinar mediante el método, c_i , en forma semejante a la ecuación (2.27):

$$v(x) = \sum_{i=1}^{N+1} c_i \Phi_i(x) \quad (2.60)$$

Las funciones Φ_i reciben el nombre de “funciones base” y cumplen la siguiente condición:

$$\Phi_k(x_i) = \delta_{ki} \quad (2.61)$$

en donde δ_{ki} es la delta de Kronecker y x_i son los nodos en que se desea obtener la solución aproximada. La ecuación (2.61) expresa que las funciones base tiene el valor 1 en un solo nodo (donde se cumple $i = k$) y cero en todos los demás. Esta forma de definir las funciones base tiene la ventaja de que simplifica la interpretación de los resultados, es decir, cada coeficiente c_i de la ecuación (2.60) equivale a la solución aproximada en el nodo x_i :

$$v(x_i) = c_i \quad (2.62)$$

Una forma sencilla de hacer que se cumpla la ecuación (2.61) es subdividir el dominio del problema en un conjunto de pequeños subdominios definidos por el intervalo existente entre un nodo y el siguiente. Esto requiere haber definido previamente en qué puntos se desea obtener la solución o, alternativamente, definir algún criterio para seleccionarlos. Cada uno de estos subdominios recibe el nombre de “elemento” y de aquí se deriva el nombre del método. Esto facilita la definición de las funciones base por trozos, entre un nodo y su vecino, o incluyendo más nodos si esto es necesario para definir completamente la función base, de tal forma que cada función cumpla la ecuación (2.61). Generalmente las funciones base valen cero en todo el dominio del problema, excepto en los elementos contiguos al nodo con que están relacionados.

Por ejemplo, la función base más simple está compuesta por dos rectas: una que va del nodo $i-1$, donde vale cero, hasta el nodo i , donde vale uno, y otra que va del nodo i , donde vale uno, al nodo $i+1$, donde vale cero. En los intervalos $x < x_{i-1}$ y $x > x_{i+1}$ esta función base vale cero. Este ejemplo muestra que es posible usar funciones base muy sencillas, como polinomios de grado pequeño, para obtener la solución aproximada del tipo (2.60). Por tanto, una diferencia importante entre el método de colocación ortogonal y el de elementos finitos es que, mientras

en aquél se utiliza un solo polinomio de grado $2(N+1)$, válido en todo el dominio, en elementos finitos se utiliza un gran número de polinomios de grado pequeño, válidos únicamente en el subdominio que les corresponde.

Como se mencionó anteriormente, dentro del método de residuos ponderados existen varios métodos para determinar las constantes c_i de la ecuación (2.60). El método que se usó en el presente trabajo fue el de Galerkin, en el cual se tiene el residuo ortogonal a las $N+1$ funciones base:

$$\int_0^1 R(x) \Phi_k dx = 0 \quad k = 1, \dots, N+1 \quad (2.63)$$

Utilizando la ecuación (2.60) en la definición del residuo (2.28) y sustituyendo en la (2.63) se obtiene:

$$\int_0^1 \left[L \left(\sum_{i=1}^{N+1} c_i \Phi_i(x) \right) - f(x) \right] \Phi_k dx = 0 \quad k = 1, \dots, N+1 \quad (2.64)$$

Las $N+1$ ecuaciones (2.64) pueden utilizarse para determinar las $N+1$ incógnitas c_i bajo el criterio de Galerkin. La solución de este sistema requiere la selección de un operador diferencial L en particular y operarlo sobre la solución aproximada, dada por la sumatoria de las funciones base. Este proceso da como resultado un sistema de ecuaciones de la forma:

$$\left[\int_0^1 (\text{expresión en } \Phi_i \text{ y } \Phi_k) dx \right] c_i = \int_0^1 f(x) \Phi_k dx \quad (2.65)$$

con $i, k = 1, \dots, N+1$. Este conjunto de ecuaciones puede expresarse en la forma matricial:

$$\mathbf{Kc} = \mathbf{F} \quad (2.66)$$

Una vez definido el operador L , todos los elementos de la matriz $\mathbf{K}$ son conocidos, así como los del vector $\mathbf{F}$. El vector de incógnitas, $\mathbf{c}$, de acuerdo con la ecuación (2.62), representa la solución aproximada, evaluada en los nodos.

Para concretar la formulación de este sistema matricial, es necesario escribirlo en términos de la ecuación de calor con generación interna.

Elementos Finitos en la Ecuación de Calor

Para adaptar la ecuación $L(u) = f$ a la resolución del problema de conducción de calor con generación interna mediante elementos finitos, tienen plena vigencia las ecuaciones (2.47) a (2.50) que se dedujeron para el método de colocación ortogonal. Sustituyendo las expresiones (2.49) y (2.50) en la (2.64) se tiene:

$$\int_0^1 \left[-\Delta \tau \left(\frac{\partial^2 \Theta(Z)}{\partial Z^2} \right) + \Theta(Z) \right] \Phi_k(Z) dZ = \int_0^1 (\Theta_{j-1} + \Delta X_{j-1}) \Phi_k(Z) dZ \quad (2.67)$$

$$k = 1, \dots, N+1$$

en donde el subíndice $j-1$ representa las propiedades evaluadas en el nodo temporal anterior y $\Theta(Z)$ represente la distribución espacial de temperaturas dada por:

$$\Theta(Z) = \sum_{i=1}^{N+1} \Theta_i \Phi_i(Z) \quad (2.68)$$

En esta expresión las Θ_i son las temperaturas aproximadas en los nodos en el tiempo actual j , es decir, son constantes por determinarse, análogas a las c_i de la ecuación (2.60).

Integrando por partes el término de segundo orden en la ecuación (2.67) se obtiene:

$$\begin{aligned} -\Delta \tau \Phi_k(Z) \frac{\partial \Theta(Z)}{\partial Z} \Big|_0^1 + \Delta \tau \int_0^1 \left[\frac{\partial \Theta(Z)}{\partial Z} \frac{\partial \Phi_k(Z)}{\partial Z} + \Theta(Z) \Phi_k(Z) \right] dZ = \\ \int_0^1 (\Theta_{j-1} + \Delta X_{j-1}) \Phi_k(Z) dZ \\ k = 1, \dots, N+1 \end{aligned} \quad (2.69)$$

El primer término de la expresión anterior permite la aplicación de las condiciones de frontera $\partial \Theta(Z)/\partial Z = 0$ en $Z = 0$ y $\partial \Theta(Z)/\partial Z = Bi(\Theta_a - \Theta_p)$ en $Z = 1$. Con esto, y usando la ecuación (2.61) para el valor de Φ_k , el primer término de la ecuación (2.69) se convierte en:

$$-\Delta \tau Bi(\Theta_a - \Theta_p) \quad (2.70)$$

en donde el subíndice p significa que Θ se evalúa en la pared, es decir, es el valor de Θ obtenido en $Z = 1$. Diferenciando la expresión para Θ , (2.68) para emplearla en la ecuación (2.69) se obtiene:

$$\frac{\partial \Theta(Z)}{\partial Z} = \sum_{i=1}^{N+1} \Theta_i \frac{\partial \Phi_i(Z)}{\partial Z} \quad (2.71)$$

La sustitución de las ecuaciones (2.68), (2.70) y (2.71) en la (2.69) da como resultado un sistema de la forma (2.66), $\mathbf{K}\boldsymbol{\Theta} = \mathbf{F}$, con elementos:

$$K_{k,i} = \int_0^1 \left[\Delta \tau \left(\frac{\partial \Phi_i}{\partial Z} \right) \left(\frac{\partial \Phi_k}{\partial Z} \right) + \Phi_i \Phi_k \right] dZ \quad (2.72a)$$

$$\Theta_i = \Theta_{i,j} \quad (2.72b)$$

$$F_i = \int_0^1 (\Theta_{j-1} + \Delta X_{j-1}) \Phi_i dZ + \Delta \tau Bi(\Theta_a - \Theta_{p,j-1}) \delta_{N+1,i} \quad (2.72c)$$

La matriz $\mathbf{K}$ se conoce como la “matriz de rigidez” y el vector $\mathbf{F}$ como “vector de fuerzas”, por razones históricas relacionadas con la aplicación de este método a la mecánica de estructuras. En este sistema ya están incluidas las condiciones de frontera. El subíndice i,j para la temperatura significa la propiedad obtenida en el nodo espacial i y el tiempo j . La delta de

Kronecker en la última ecuación es para hacer que último término aparezca sólo en el elemento $N+1$ del vector $\mathbf{F}$, para incluir la condición de frontera en la pared.

Las integrales del sistema (2.72) pueden resolverse en forma analítica o mediante cuadraturas. En general, es posible hacerlo por métodos numéricos sin pérdida de exactitud. Sin embargo, en el presente trabajo dichas integrales fueron evaluadas analíticamente.

El hecho de que las funciones base estén definidas en forma semejante dentro de cada subdominio da lugar al concepto de funciones base “locales”, semejantes dentro de cada elemento y a una pequeña matriz “local” asociada con cada elemento. Cada una de estas matrices es muy semejante a todas las demás y su superposición en forma adecuada da lugar a la matriz “global” del sistema ($\mathbf{K}$). Por ahorro de espacio no se detalla aquí la técnica especial para la construcción de las matrices, que es característica del método de elementos finitos. En las secciones siguientes se mencionan sólo los elementos de las matrices y los vectores locales. Los elementos de la matriz global $\mathbf{K}$ y del vector $\mathbf{F}$ que fueron empleados en este trabajo pueden consultarse en el listado del programa principal POLICOMP.BAS, que se encuentra en el Anexo III.

Funciones Base Lineales

En el presente trabajo se utilizaron tres tipos de funciones base: lineales, de segundo grado y polinomios cúbicos de Hermite. A continuación se hace una descripción de estas funciones base en la forma como fueron empleadas.

Aunque el método de elementos finitos permite y facilita la utilización de nodos con separación variable, en todos los casos los nodos se definieron en forma equidistante, para facilitar la comparación entre los métodos numéricos. La distancia que separa dos nodos aparece en la definición de todas las funciones base, por lo que se utiliza la letra h para esa distancia. Como el dominio del problema es en el intervalo $[0,1]$, la relación entre h y el número de elementos, N , es:

$$h = \frac{1}{N} \quad (2.73)$$

Las funciones base lineales constituyen el caso más simple de aplicación del método de elementos finitos. En algunos casos puede demostrarse la equivalencia entre las expresiones que resultan en este método y las que se obtienen en el de diferencias finitas.

Los elementos contruidos con base en funciones lineales incluyen dos nodos, uno en cada extremo del subdominio en que son válidos. Dos nodos son suficientes para trazar dos rectas que cumplan con la ecuación (2.61) y están dadas por las siguientes funciones base locales:

$$\Phi_{(1)} = \frac{Z}{h} \quad \Phi_{(2)} = 1 - \frac{Z}{h} \quad (2.74)$$

y las derivadas de estas expresiones, para utilizarse en las ecuaciones (2.72) son:

$$\frac{\partial \Phi_{(1)}}{\partial Z} = \frac{1}{h} \quad \frac{\partial \Phi_{(2)}}{\partial Z} = -\frac{1}{h} \quad (2.75)$$

La sustitución de las expresiones (2.74) y (2.75) en la (2.72) da como resultado la matriz local, de 2x2, asociada a cada elemento finito, con los siguientes elementos:

$$\begin{array}{cc} \frac{3\Delta\tau + h^2}{3h} & \frac{-6\Delta\tau + h^2}{6h} \\ \frac{-6\Delta\tau + h^2}{6h} & \frac{3\Delta\tau + h^2}{3h} \end{array} \quad (2.76)$$

y los siguientes elementos en el vector **F**:

$$\begin{aligned} F_1 &= \frac{h}{6} [2(\Theta_{1,j-1} + \Delta X_{1,j-1}) + (\Theta_{2,j-1} + \Delta X_{2,j-1})] \\ F_2 &= \frac{h}{6} [(\Theta_{1,j-1} + \Delta X_{1,j-1}) + 2(\Theta_{2,j-1} + \Delta X_{2,j-1})] \end{aligned} \quad (2.77)$$

Al ensamblar la matriz global **K** con estos elementos más la condición de frontera incluida en la ecuación (2.72) se obtiene una matriz tridiagonal de (N+1)x(N+1) (cfr. Anexo III en la sección de elementos finitos).

Funciones Base Cuadráticas

Las funciones base cuadráticas tienen la ventaja de que producen una mejor aproximación, pero en cambio requieren más trabajo de cómputo porque cada elemento comprende tres nodos: uno en cada extremo del elemento y otro a la mitad. Esto es debido a que se requieren tres puntos para trazar una parábola. Por otro lado, existen tres formas de plantear estas parábolas de tal forma que cumplan con la ecuación (2.61). Las funciones locales son:

$$\Phi_{(1)} = 1 - \frac{3}{h}Z + \frac{2}{h^2}Z^2 \quad \Phi_{(2)} = \frac{4}{h}Z - \frac{4}{h^2}Z^2 \quad \Phi_{(3)} = -\frac{1}{h}Z + \frac{2}{h^2}Z^2 \quad (2.78)$$

y sus correspondientes derivadas:

$$\frac{\partial \Phi_{(1)}}{\partial Z} = -\frac{3}{h} + \frac{4}{h^2}Z \quad \frac{\partial \Phi_{(2)}}{\partial Z} = \frac{4}{h} - \frac{8}{h^2}Z \quad \frac{\partial \Phi_{(3)}}{\partial Z} = -\frac{1}{h} + \frac{4}{h^2}Z \quad (2.79)$$

La sustitución de las ecuaciones (2.78) y (2.79) en la ecuación (2.72) produce los siguientes elementos para la matriz local:

$$\begin{array}{ccc}
 \frac{2h^2 + 35\Delta\tau}{15h} & \frac{h^2 - 40\Delta\tau}{15h} & \frac{-h^2 + 10\Delta\tau}{30h} \\
 \frac{h^2 - 40\Delta\tau}{15h} & \frac{8h^2 + 80\Delta\tau}{15h} & \frac{h^2 - 40\Delta\tau}{15h} \\
 \frac{-h^2 + 10\Delta\tau}{30h} & \frac{h^2 - 40\Delta\tau}{15h} & \frac{2h^2 + 35\Delta\tau}{15h}
 \end{array} \quad (2.80)$$

y los elementos para el vector local:

$$\begin{aligned}
 F_1 &= \frac{h}{30} [4(\Theta_{1,j-1} + \Delta X_{1,j-1}) + 2(\Theta_{2,j-1} + \Delta X_{2,j-1}) - (\Theta_{3,j-1} + \Delta X_{3,j-1})] \\
 F_2 &= \frac{h}{15} [(\Theta_{1,j-1} + \Delta X_{1,j-1}) + 8(\Theta_{2,j-1} + \Delta X_{2,j-1}) + (\Theta_{3,j-1} + \Delta X_{3,j-1})] \\
 F_3 &= \frac{h}{30} [-(\Theta_{1,j-1} + \Delta X_{1,j-1}) + 2(\Theta_{2,j-1} + \Delta X_{2,j-1}) + 4(\Theta_{3,j-1} + \Delta X_{3,j-1})]
 \end{aligned} \quad (2.81)$$

La composición de la matriz global, **K**, a partir de los elementos dados por las expresiones (2.80) y (2.81), más la condición frontera incluida en la ecuación (2.72) produce una matriz de $(2N+1) \times (2N+1)$ elementos en cinco bandas. Véase el Anexo III en la sección de elementos finitos de segundo grado para composición exacta de las matrices.

Funciones Base Cúbicas de Hermite

Los polinomios cúbicos de Hermite comprenden dos nodos por cada elemento y se pueden formular cuatro funciones dentro de cada uno de ellos. Dos de las funciones aproximan la función original y las otras dos su derivada, es decir, existen dos funciones que cumplen la condición (2.61), que establece que el valor es uno en cierto nodo y cero en todos los demás, mientras que su derivada vale cero en todos los nodos. Por otro lado, los otros dos polinomios cumplen la condición de que valen cero en todos los nodos, pero su derivada vale $1/h$ en el nodo que les corresponde. De esta forma es posible ajustar con gran precisión no sólo los valores de las funciones en los nodos sino que, simultáneamente, se ajustan los valores de la primera derivada espacial, obedeciendo también al criterio de Galerkin.

Una diferencia importante entre el método de elementos finitos con polinomios de Hermite y los otros dos mencionados anteriormente es la que se describe a continuación. El sistema de

ecuaciones que se construye con la matriz global tiene $2(N+1)$ incógnitas ($N+1$ valores de la función y $N+1$ valores de la derivada). Sin embargo, como dos de las funciones de Hermite se utilizan para ajustar las derivadas espaciales, y como existen dos condiciones de frontera dadas, precisamente, como derivadas espaciales, resulta que de las $2(N+1)$ incógnitas que se tendrían, dos ya son conocidas o pueden formularse en términos de los valores de las funciones. Por tanto, es posible eliminar dos ecuaciones y formular un sistema con $2N$ incógnitas. El efecto que se busca al hacer esto no es disminuir el tamaño de la matriz, sino interconstruir las condiciones de frontera en las funciones base.

Las funciones base locales, utilizando polinomios de Hermite, son:

$$\begin{aligned}\Phi_{(1)} &= 1 - \frac{3}{h^2}Z^2 + \frac{2}{h^3}Z^3 & \Phi_{(2)} &= \frac{1}{h}Z - \frac{2}{h^2}Z^2 + \frac{1}{h^3}Z^3 \\ \Phi_{(3)} &= \frac{3}{h^2}Z^2 - \frac{2}{h^3}Z^3 & \Phi_{(4)} &= -\frac{1}{h^2}Z^2 + \frac{1}{h^3}Z^3\end{aligned}\quad (2.82)$$

De estas funciones, $\Phi_{(1)}$ y $\Phi_{(3)}$ son las que aproximan la función, mientras que $\Phi_{(2)}$ y $\Phi_{(4)}$ aproximan la derivada espacial. Sus derivadas correspondientes son:

$$\begin{aligned}\frac{\partial \Phi_{(1)}}{\partial Z} &= -\frac{6}{h^2}Z + \frac{6}{h^3}Z^2 & \frac{\partial \Phi_{(2)}}{\partial Z} &= \frac{1}{h} - \frac{4}{h^2}Z + \frac{3}{h^3}Z^2 \\ \frac{\partial \Phi_{(3)}}{\partial Z} &= \frac{6}{h^2}Z - \frac{6}{h^3}Z^2 & \frac{\partial \Phi_{(4)}}{\partial Z} &= -\frac{2}{h^2}Z + \frac{3}{h^3}Z\end{aligned}\quad (2.83)$$

Con estas definiciones y utilizando la ecuación (2.72) se obtienen los elementos de la matriz local:

$$\begin{array}{cccc}\frac{13h^2 + 42\Delta\tau}{35h} & \frac{11h^2 + 21\Delta\tau}{210h} & \frac{9h^2 - 84\Delta\tau}{70h} & \frac{-13h^2 + 42\Delta\tau}{420h} \\ \frac{11h^2 + 21\Delta\tau}{210h} & \frac{h^2 + 14\Delta\tau}{105h} & \frac{13h^2 - 42\Delta\tau}{420h} & \frac{-3h^2 - 14\Delta\tau}{420h} \\ \frac{9h^2 - 84\Delta\tau}{70h} & \frac{13h^2 - 42\Delta\tau}{420h} & \frac{13h^2 + 42\Delta\tau}{35h} & \frac{-11h^2 - 21\Delta\tau}{210h} \\ \frac{-13h^2 + 42\Delta\tau}{420h} & \frac{-3h^2 - 14\Delta\tau}{420h} & \frac{-11h^2 - 21\Delta\tau}{210h} & \frac{h^2 + 14\Delta\tau}{105h}\end{array}\quad (2.84)$$

y los elementos del vector local:

$$\begin{aligned}
F_1 &= \frac{h}{420} [156(\Theta_{1,j-1} + \Delta X_{1,j-1}) + 22\Theta'_{1,j-1} + 54(\Theta_{2,j-1} + \Delta X_{2,j-1}) - 13\Theta'_{2,j-1}] \\
F_2 &= \frac{h}{420} [22(\Theta_{1,j-1} + \Delta X_{1,j-1}) + 4\Theta'_{1,j-1} + 13(\Theta_{2,j-1} + \Delta X_{2,j-1}) - 3\Theta'_{2,j-1}] \\
F_3 &= \frac{h}{420} [54(\Theta_{1,j-1} + \Delta X_{1,j-1}) + 13\Theta'_{1,j-1} + 156(\Theta_{2,j-1} + \Delta X_{2,j-1}) - 22\Theta'_{2,j-1}] \\
F_4 &= \frac{h}{420} [-13(\Theta_{1,j-1} + \Delta X_{1,j-1}) - 3\Theta'_{1,j-1} - 22(\Theta_{2,j-1} + \Delta X_{2,j-1}) + 4\Theta'_{2,j-1}]
\end{aligned} \tag{2.85}$$

en donde la variable $\Theta'_{i,j-1}$ indica el valor de la derivada espacial de la temperatura en el nodo i , obtenido en el tiempo anterior, $j-1$, por medio de las funciones que aproximan la derivada. La relación que existe entre los resultados que se obtienen al resolver el sistema de ecuaciones y la derivada espacial está dada por las ecuaciones (2.83) y es:

$$\frac{\partial \Theta_i}{\partial Z} = \Theta'_i = h \left(\frac{\partial \Phi_i}{\partial Z} \right) \tag{2.86}$$

La combinación de esta matriz y vector locales, más la condición frontera que aparece en la ecuación (2.72) se utilizan para armar la matriz y el vector globales que aparecen en el Anexo III, en la sección de elementos finitos con polinomios de Hermite.

Nomenclatura del Capítulo II

Las negritas, en el texto, denotan matrices o vectores.

A	matriz que relaciona la primera derivada con la función, en colocación ortogonal
B	matriz que relaciona la segunda derivada con la función, en colocación ortogonal
Bi	número de Biot = $U(H/2)/k$, adimensional (cfr. Capítulo I)
C	matriz con elementos $C_{j,i} = (2i-2)x_j^{2i-3}$, en colocación ortogonal
D	matriz con elementos $D_{j,i} = (2i-3)(2i-2)x_j^{2i-4}$, en colocación ortogonal
Da	número de Damköhler = $(H^2 AC_0^{n-1} \rho C_p) / (4k e^{-\gamma})$, adimensional (cfr. Capítulo I)
F	vector “de fuerzas” en elementos finitos
h	distancia entre nodos, en elementos finitos
K	matriz “de rigidez” en elementos finitos
L	matriz “compuesta” para colocación ortogonal
L	operador diferencial
N+1	número de nodos espaciales, incluyendo el centro y la pared
n	orden de la reacción, adimensional

p	factor de ponderación hacia adelante en diferencias finitas
$P_{i-1}(x)$	polinomio de grado $i-1$ en x
$P_i(Z^2)$	polinomio de grado par en Z , para colocación ortogonal
Q	matriz de elementos $Q_{j,i} = x_j^{2i-2}$, en colocación ortogonal
$R(x)$	residuo al usar la solución aproximada en la ecuación diferencial
$v(x)$	solución aproximada a una ecuación diferencial
$W(x)$	factor de ponderación en residuos ponderados
w_j	factor de ponderación en una cuadratura
X	conversión adimensional = $(C_0 - C)/C_0$
x_j	j -ésima raíz de un polinomio usado para colocación ortogonal
Z	coordenada espacial adimensional = $x/(H/2)$

Letras griegas:

γ	energía de activación adimensional = $E_a/(R\Delta T_{ad})$ (cfr. Capítulo I)
ΔZ	distancia adimensional entre dos nodos espaciales (constante)
$\Delta \tau$	incremento de tiempo adimensional (constante) (cfr. Capítulo I)
δ	= $\Delta \tau/(\Delta Z)^2$, cociente utilizado en diferencias finitas
δ_{ij}	función delta de Kronecker
$\delta(x-x_i)$	función delta del Dirac
Θ	temperatura adimensional = $T/\Delta T_{ad}$ (cfr. Capítulo I)
τ	tiempo adimensional = $(4\alpha/H^2)t$ (cfr. Capítulo I)
Φ_i	i -ésima función base global, en elementos finitos
$\Phi_{(i)}$	i -ésima función base local, en elementos finitos

Subíndices:

a	propiedad del fluido exterior
i	subíndice para nodo espacial
j	subíndice para nodo temporal
p	propiedad evaluada en la pared del molde

Capítulo III

Comparación de los Métodos Numéricos

The purpose of computing is insight, not numbers.
R.W. Hamming

El Programa de Cómputo

Para realizar la comparación de los métodos numéricos se diseñó y realizó un programa de computadora que permitiera resolver el problema por varios métodos, incluyendo el caso analítico descrito en el Capítulo I, y comparar sus resultados. El programa fue escrito en Turbo Basic[®] versión 1.1 de Borland International Inc. Un trabajo anterior realizado en la Facultad de Ciencias Químicas de la Universidad de Guadalajara contiene algunos antecedentes de este programa y de este trabajo en general [Hernández Vargas, 1985].

En el Anexo III se encuentran los listados del programa principal, POLICOMP.BAS. Sus subrutinas se encuentran en el Anexo IV. Por ahorro de espacio, y por estar fuera del objetivo de este trabajo, no se hace una descripción minuciosa del programa. Es probable que los comentarios incluidos en el Anexo III y en el código mismo, junto con la forma estructurada que permite el Turbo Basic, provean suficiente información para el lector interesado en estudiarlo, modificarlo o reproducirlo.

Definiciones y Abreviaturas

A continuación se dan algunas definiciones de parámetros estadísticos que se emplearon en las comparaciones. El primer criterio de comparación entre dos métodos es el “error” entre los resultados obtenidos por dos métodos diferentes en un cierto nodo, definido por la expresión.

$$E_{i,j} = y_{i,j}^c - y_{i,j}^r \quad (3.1)$$

donde y^c representa la propiedad que se quiere comparar (temperatura, conversión o velocidad de reacción) y y^r representa la misma propiedad calculada por un método considerado como referencia. Nótese que esta definición de error no encierra la idea de “resultado falso”, sino únicamente la diferencia entre los resultados obtenidos por dos métodos diferentes. Cuando el método de referencia es exacto –como en el caso que tiene solución analítica– entonces sí se puede hablar de error en el sentido de “desviación respecto de la solución del problema”.

También son de interés el “error porcentual” definido por:

$$E\%_{i,j} = 100 \frac{y_{i,j}^c - y_{i,j}^r}{y_{i,j}^r} \quad (3.2)$$

y el “error medio” definido por:

$$EM = \frac{1}{N} \sum_{k=1}^N E_k \quad (3.3)$$

donde N es el total de nodos en que se quiere promediar el error. El error medio tiene la desventaja de que los errores positivos pueden anularse con los errores negativos. Esto puede llevar a la situación de que se encuentre un error medio pequeño aunque los resultados de un método no coincidan con los de otro, sino que oscilen a su alrededor. Para evitar esta confusión, se empleó el promedio de los valores absolutos de los errores porcentuales, abreviado EPAM (“error porcentual absoluto medio”, conocido también como MAPE por sus siglas en inglés, “mean absolute percent error”) y definido por:

$$EPAM = \frac{1}{N} \sum_{k=1}^N |E\%_k| \quad (3.4)$$

El EPAM tiene las ventajas de que las desviaciones positivas no se anulan con las negativas y de que el resultado tiene un significado porcentual de fácil interpretación. El EPAM es de especial utilidad en la comparación de propiedades cuyo valor no es cercano a cero (en el presente trabajo es el caso de la temperatura). Como puede observarse en la ecuación (3.2), si la propiedad obtenida por el método de referencia, y^r , es muy cercana a cero, el error porcentual tenderá a verse amplificado, aunque el error “simple” no sea muy grande. Esto cobró importancia en las comparaciones de velocidad de generación, que son muy pequeñas, y por consiguiente el EPAM obtenido era muy grande.

En algunas gráficas y tablas se usarán las siguientes abreviaturas para los diferentes métodos y sus características:

DAD	diferencias finitas hacia adelante
DAT	diferencias finitas hacia atrás
CN	método de Crank-Nicolson
COL	colocación ortogonal
EFL	elementos finitos lineales
EF2	elementos finitos de segundo grado
EFH	elementos finitos de Hermite
DTAT	incremento de tiempo adimensional
NINCT	número de incrementos de tiempo
NINCZ	número de divisiones espaciales

Esquema General de Comparación de los Métodos Numéricos

La comparación de los métodos numéricos se realizó siguiendo el siguiente esquema general:

1. Comparación del caso adiabático.
2. Determinación de restricciones mostradas por los métodos numéricos respecto del problema específico a resolver.
3. Comparación de los métodos numéricos respecto de la solución analítica.
4. Comparación del caso con pared isotérmica.
5. Comparación de un caso con un número de Biot de valor intermedio.

Para el caso adiabático no se esperaban diferencias significativas entre los métodos, dado que con las condiciones iniciales de perfil plano de temperatura y composición no hay transferencia de calor en el dominio espacial. Sin embargo, el estudio de este caso tiene sentido porque permite analizar el efecto del método numérico que se emplea para calcular la generación de calor interna sobre los demás casos.

Durante la validación de los programas de cómputo para los diferentes métodos se encontraron casos en los que se presentaban resultados con alguna anomalía, como divergencia total, y particularmente oscilación en la temperatura calculada para la pared. Por esta razón fue necesario determinar las condiciones en las que se presentan estos resultados anómalos.

La comparación con la solución analítica (que no tiene significado físico en el contexto del presente trabajo. Cfr. Capítulo I) se utilizó para escoger el método más adecuado que sirviera de referencia para las demás comparaciones.

Se consideró de interés también comparar el caso con pared isotérmica, utilizando las condiciones frontera indicadas en la ecuación (1.20), es decir, sin forzar la temperatura como constante en el método numérico (lo cual hubiera sido sencillo) sino a través de un número de Biot muy grande para simular lo que físicamente se lograría por medio de una alta transferencia de calor externa por convección forzada.

Por último, dado que el caso real de simulación del problema no corresponde al de pared isotérmica [Broyer y Macosko, 1978; Lee y Macosko, 1980], y dado que la ecuación (1.20) no permite resolver confiablemente este caso mediante todos los métodos, se hicieron las comparaciones finales en un caso con $Bi = 5$.

Comparación del Caso Adiabático

En esta sección se realizaron comparaciones de temperaturas y conversiones obtenidas con caso adiabático ($Bi = 0$; véase la figura 1.2). Se encontró que, salvo pequeñísimas diferencias atribuibles a redondeos numéricos, los resultados por todos los métodos son iguales. Esto únicamente comprueba un resultado esperado: como todos los métodos usan la misma subrutina para integrar numéricamente la conversión y para calcular la generación de calor

interna y, como no existe transferencia de calor, todos los métodos deberían dar los mismos resultados.

La integración de la generación interna se realiza mediante la subrutina de Runge-Kutta presentada en el Anexo IV, que es de cuarto orden con extrapolación de Richardson. El comportamiento de este método se manifiesta en el siguiente análisis, cuyas conclusiones son de interés para el caso más general, no adiabático, como se verá más adelante.

Se compararon los resultados obtenidos al integrar con diferentes tamaños de incremento de tiempo adimensional, usando diferentes valores de calor de reacción, con $Bi = 0$ y todas las demás propiedades físicas constantes. Ante la falta de un método analítico para resolver la ecuación (1.24), junto con su condición inicial, las comparaciones se hicieron respecto del mismo método, utilizando un tamaño de paso temporal menor. Se utilizó como referencia el caso con $\Delta\tau = 0.000625$, y las comparaciones se realizaron para los casos con $\Delta\tau = 0.00125$, 0.0025 , 0.005 y 0.01 . En algunos casos fue posible también resolver el problema con $\Delta\tau = 0.02$ y 0.04 . La selección de estos valores obedece a que son los múltiplos consecutivos del valor de referencia, y es el único modo de obtener resultados estrictamente comparables.

Las figuras 3.1 y 3.2 muestran los resultados obtenidos (los mismos datos, graficados de diferente forma, presentados en el Anexo V): el eje vertical es el error porcentual absoluto medio, EPAM, obtenido con corridas de duración suficiente para lograr una conversión muy cercana a la unidad. El eje horizontal en la figura 3.1 es el tamaño del incremento de tiempo utilizado. El EPAM es prácticamente proporcional al tamaño del paso temporal. Con calores de reacción mayores que cierto valor crítico no determinado (las dos curvas superiores de la figura 3.1), el método numérico diverge si se tiene un tamaño de paso temporal relativamente grande (casos simbolizados por estrellas).

En la figura 3.2 el eje horizontal es el incremento de temperatura adiabático. En ésta se observa que el error aumenta en forma casi exponencial con el calor de reacción (expresado aquí como ΔT_{ad}).

Estas observaciones son importantes porque en muchos de los casos estudiados en la comparación de los métodos numéricos, se obtiene divergencia *por causa de la generación de calor interna*, o del método numérico involucrado, independientemente de lo que suceda con la transferencia de calor y del método numérico utilizado para su cálculo. Esto sucede en los siguientes casos:

- a) Cuando el tamaño de paso temporal es relativamente grande, en función de ΔT_{ad} y otros parámetros cinéticos, como sucede en las dos curvas superiores de la figura 3.1, y
- b) Cuando la pared está a una temperatura inicial relativamente alta respecto de la temperatura inicial del reactivo, con lo cual se produce (en la realidad física y en el cálculo) un aumento súbito en la velocidad de la reacción en las cercanías de la pared, con su consiguiente exceso de generación interna y posible divergencia en el cálculo.

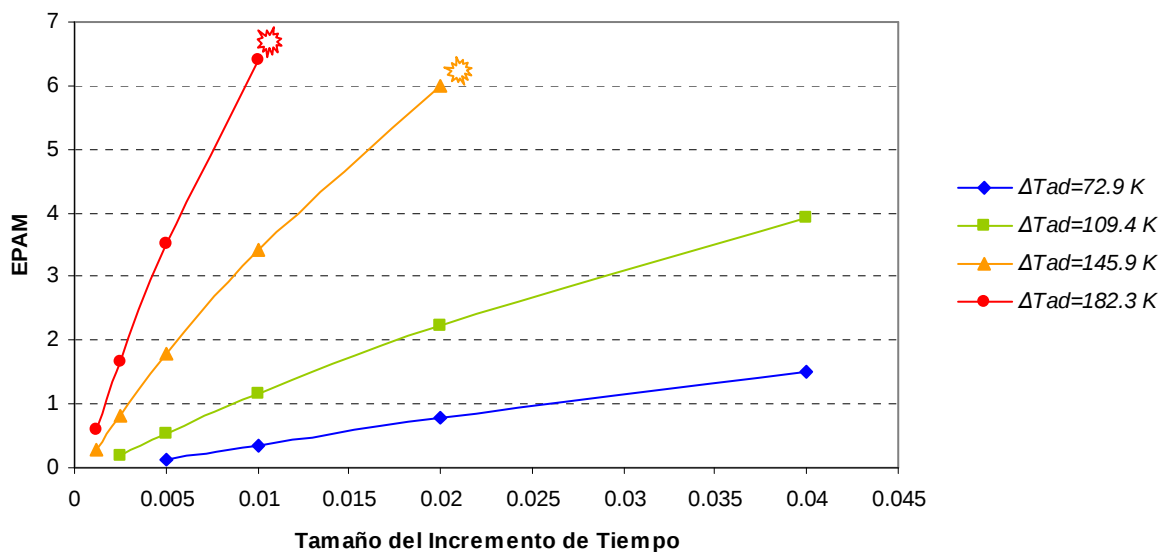


Figura 3.1. EPAM del caso adiabático en función del tamaño de paso en tiempo, para diferentes incrementos de temperatura adiabáticos (calores de reacción)³

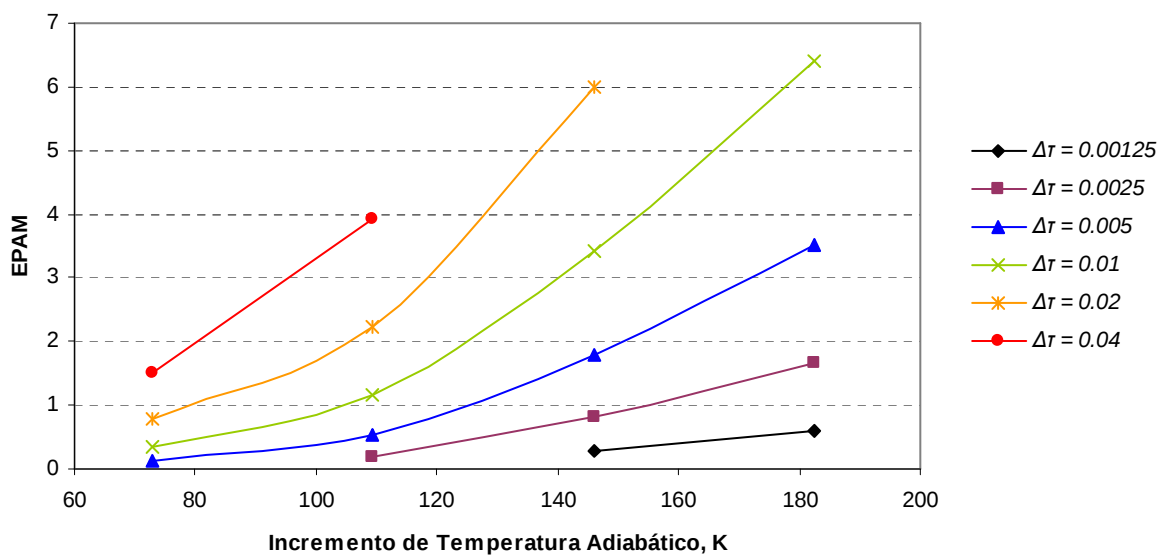


Figura 3.2. EPAM del caso adiabático en función del incremento de temperatura adiabático, para diversos tamaños de incremento de tiempo⁴

³ En esta figura todas las curvas convergen a un punto en el que el EPAM es cero, donde la abscisa es 0.000625. Esto es consecuencia de que el método de referencia para el cálculo del EPAM tiene un $\Delta \tau$ de esa magnitud. Analizando las diferentes curvas de esta gráfica es posible estimar cuál sería el EPAM del método de referencia respecto de uno hipotético con $\Delta \tau = 0$, para así estimar el EPAM respecto de “la realidad”. Esto equivaldría, en la figura 3.1, a hacer una traslación en el eje de las abscisas, para que las curvas convergieran al punto (0,0).

⁴ El suavizado de las curvas se hizo con una función de la hoja de cálculo y no corresponde a ningún modelo predeterminado. La curva de $\Delta \tau = 0.04$ aparece como recta porque sólo fue posible calcular dos puntos, según se explica en el texto.

La figura 3.3 muestra la evolución del error porcentual en función del tiempo, para diversas corridas en las que se utilizaron diferentes tamaños de paso temporal ($\Delta\tau$), respecto del caso con $\Delta\tau = 0.000625$, utilizando $\Delta T_{ad} = 145.85$ K, que corresponde a un caso real con los datos de la tabla 1.2. La cúspide de la “joroba” en estas gráficas corresponde prácticamente o es muy cercano al tiempo en el cual la velocidad de reacción es máxima según los cálculos de cada tamaño de paso temporal. En esta figura se ve de dónde proviene el EPAM reportado en la segunda gráfica superior de la figura 3.1. Asimismo, se ve que el error máximo, y el que se genera en el lapso con más velocidad de reacción, crece rápidamente conforme aumenta el tamaño de paso temporal, $\Delta\tau$. Como se verá más adelante, esta propiedad *del sistema físico* resulta determinante para el comportamiento de *los métodos numéricos*.

En la figura 3.3 también se observa que el error porcentual máximo se retrasa a medida que aumenta el tamaño de paso temporal. Esto indica que el cálculo de la velocidad de reacción, así como los resultados de temperatura y conversión, también se retrasan sensiblemente a medida que aumenta el $\Delta\tau$.

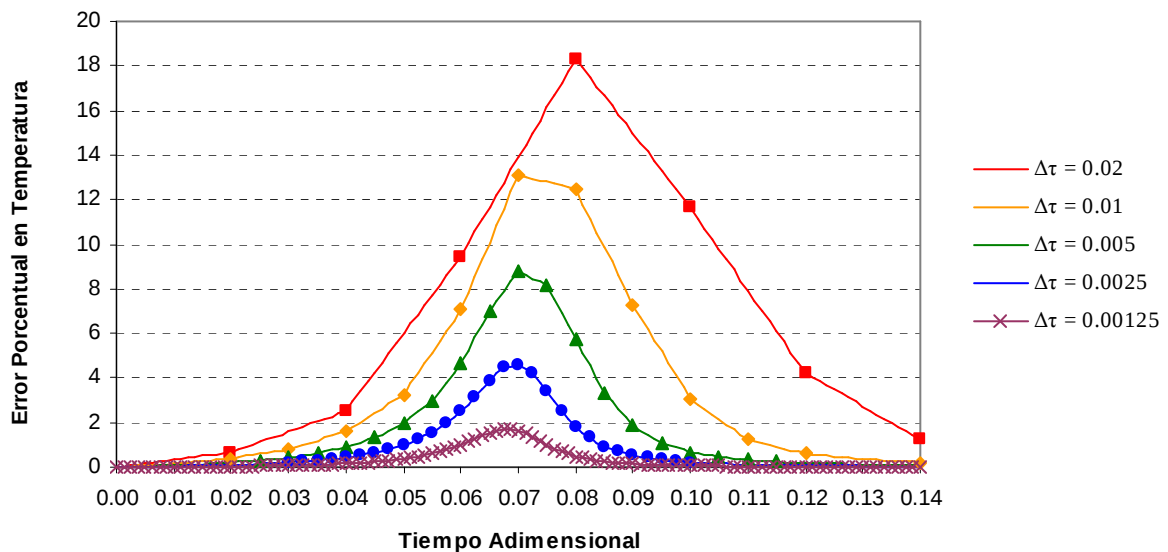


Figura 3.3. Error porcentual en temperatura del caso adiabático, en función del tiempo, respecto del caso con $\Delta\tau = 0.000625$, en corridas realizadas con diversos tamaños de paso temporal ⁵

⁵ Las líneas que unen los marcadores en esta figura no tienen ningún significado; se presentan sólo con fines de facilitar la interpretación gráfica de los datos. Esta misma situación existe en las demás figuras del presente capítulo en las que la ordenada es el error (EPAM o E%). Particularmente, cuando la abscisa es el tiempo adimensional, las líneas que unen los marcadores no tienen un significado ni siquiera para interpolación.

Oscilación de la Temperatura en la Pared

Desde las corridas de prueba de los diferentes métodos numéricos se observó que algunos de éstos producen una oscilación en la temperatura de la pared si el número de Biot es mayor que cierto valor crítico. Es obvio que desde el punto de vista de la representación gráfica, y de la misma solución numérica, podría fijarse como constante la temperatura en la pared, estableciéndola así en la condición de frontera. Sin embargo, se prefirió conservar la ecuación (1.20) para realmente poner a prueba el comportamiento de los diversos métodos numéricos.

En el presente trabajo se entiende por “oscilación” el aumento, disminución y nuevo aumento, sucesivos, en la razón de cambio de la temperatura respecto del tiempo, entre tres valores calculados en el mismo nodo espacial, separados por incrementos de tiempo sucesivos. Cuando se obtiene este tipo de resultados carecen de significado físico. Una temperatura calculada más alta de lo debido (por efectos del método numérico) produce a su vez un cálculo exagerado de la velocidad de la reacción y, por tanto, de la generación de calor. Como la velocidad de generación de calor interna no depende linealmente de la temperatura, el efecto que produce la oscilación de ésta sobre aquélla es el de una generación excesiva de calor – carente de significado físico– y una conversión “prematura” en las cercanías de la pared. Debe notarse, sin embargo, que en algunos casos es físicamente posible una oscilación de la temperatura de la pared, en el sentido de “aumento y disminución posterior”, pero esta oscilación siempre es sobreamortiguada y su “frecuencia” normalmente corresponde a varios incrementos de tiempo en el método numérico. Para mayor claridad, la figura 3.3 muestra un caso con oscilación en la pared, con temperatura de la pared mayor que la temperatura inicial del reactivo.

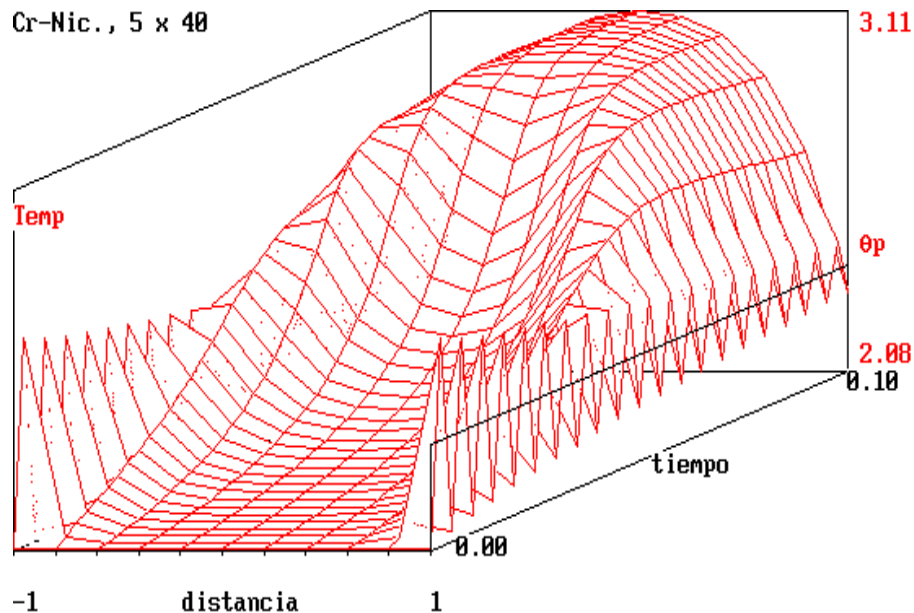


Figura 3.4. Ejemplo de oscilación amortiguada de la temperatura de la pared.
(Método de Crank-Nicolson; $Bi = 10,000$; $\Delta\Theta_w = 0.3$)

En muchos casos se observó que la oscilación de la temperatura de la pared tiende a amortiguarse a medida que transcurre el tiempo. Por tanto, puede darse un caso con oscilación inicial de la temperatura de la pared que posteriormente desaparece. Si la oscilación desaparece en pocas iteraciones, el resultado del modelado no es tan desviado de la realidad física como se describió en el párrafo anterior.

Se definieron los valores críticos del número de Biot en la siguiente forma: el “número de Biot crítico a 50 iteraciones”, $Bi_c@50$, es el mayor número de Biot que no produce oscilaciones en la temperatura de la pared al llegar al quincuagésimo incremento de tiempo. Esto significa que una corrida que se haga utilizando $Bi \leq Bi_c@50$ podrá oscilar al principio, pero dicha oscilación irá amortiguándose hasta desaparecer poco antes de la iteración número 50. Por otro lado, el “número de Biot crítico inicial”, $Bi_c@0$ se definió como el mayor número de Biot sin que se produzca oscilación alguna en la temperatura de la pared (en el sentido definido arriba). Como es de esperar, el $Bi_c@0$ representa una restricción más severa que el $Bi_c@50$, es decir, el $Bi_c@0$ siempre es menor o igual que el $Bi_c@50$.

Un valor mayor de Bi_c puede interpretarse como una mayor “tolerancia” del método numérico a la perturbación del perfil de temperaturas causado por la condición frontera en la pared. En este contexto, los métodos y casos que no oscilan pueden considerarse que tienen un $Bi_c = \infty$.

Número de Biot Crítico como Función del Tamaño de las Divisiones Espaciales

Las figuras 3.5 a 3.9 muestran los números de Biot críticos obtenidos con los diferentes métodos⁶. Los métodos de diferencias finitas hacia atrás y de colocación ortogonal *nunca presentaron oscilación en la pared*. El método de Crank-Nicolson no presenta oscilación en la pared si la temperatura del fluido exterior es igual a la temperatura inicial del reactivo. Por último, el método de elementos finitos con polinomios de Hermite presenta oscilación solamente si el número de nodos espaciales es mayor que cierto valor mínimo.

Las figuras 3.5 a 3.9 fueron obtenidas usando un incremento de tiempo adimensional $\Delta\tau = 0.005$. (Los valores se encuentran en el Anexo V). Se hicieron corridas con diferentes temperaturas del fluido exterior, identificadas en las figuras con los símbolos “ $\Delta\Theta_w$ ”. El valor de $\Delta\Theta_w$ es la diferencia entre la temperatura del fluido exterior y la temperatura inicial de los reactivos (adimensionales):

$$\Delta\Theta_w = \Theta_a - \Theta_{j=0} \quad (3.5)$$

Se encuentran graficados los valores de Bi_c obtenidos con $\Delta\Theta_w = 0.0, 0.1, 0.2$ y 0.3 , que están dentro del rango con significado físico según la bibliografía [Lee y Macosko, 1980]. En algunos casos se hicieron corridas usando $\Delta\Theta_w = 0.4$. Por razones expuestas en la sección

⁶ Nótese que las líneas que unen los marcadores en las figuras 3.5 a 3.10 carecen de significado. Son sólo para facilitar la interpretación gráfica, dado que la solución se obtiene con un número entero de nodos espaciales y no existe un continuo de posibilidades entre un valor y otro. Para las precisiones metodológicas empleadas en la determinación de los números de Biot críticos, véase el Anexo V.

anterior, no es posible hacer corridas con $\Delta\Theta_w$ mucho mayor que 0.4. Las conclusiones que se obtienen de este análisis es el siguiente:

- a) En general, el valor de Bi_c no depende fuertemente de la magnitud de la diferencia entre la temperatura inicial de los reactivos y la del fluido exterior, especialmente el caso de $Bi_c@50$. Esto es válido para todos los métodos, excepto para el de Crank-Nicolson con el cual, en el caso particular de $\Delta\Theta_w = 0$ nunca se obtiene oscilación, mientras que en los demás casos el Bi_c tiene un valor alto.
- b) El Bi_c aumenta siempre con el tamaño de las divisiones espaciales. En los métodos de diferencias finitas hacia adelante, Crank-Nicolson y elementos finitos lineales, este aumento es lineal.

La figura 3.5 muestra los números de Biot críticos del método de diferencias finitas hacia adelante. Los datos de la parte superior muestran el $Bi_c@50$. Se observa que prácticamente se sobreponen los diversos conjuntos de datos independientemente del valor de $\Delta\Theta_w$. El extremo izquierdo de este conjunto de datos (en el valor de la abscisa 0.1, equivalente a tener 10 divisiones en el dominio espacial), aparece una desviación respecto de la tendencia lineal. Además, no es posible resolver el problema con más de 10 divisiones espaciales. Esto se debe a que al haber fijado $\Delta\tau = 0.005$, en este método se tiene un límite de divisiones espaciales dado por el valor de $\delta = \Delta\tau/(\Delta Z)^2$ explicado en el Capítulo II y abordada más adelante en este mismo capítulo, en la sección “otras causas de divergencia”.

Las curvas de la parte inferior muestran los valores de $Bi_c@0$. Los casos que estrictamente no presentan oscilación están unidos por líneas continuas. Es el caso, siempre, de las corridas con $\Delta\Theta_w = 0$ (línea roja), así como los demás casos en la porción de divisiones espaciales pequeñas. Las líneas punteadas muestran los intervalos en los que se da una ligera oscilación inicial de la temperatura de la pared que, aparentemente, puede tener significado físico⁷. Se señalan con otro código (líneas punteadas) porque eventualmente esto corresponde a un fenómeno diferente, que altera el criterio de determinación y comparación del Bi_c . En estos casos incluso se observa que existe algún tamaño de divisiones espaciales para el cual el $Bi_c@0$ se acerca mucho al valor del $Bi_c@50$, es decir, el único modo de que no existan oscilaciones posteriormente es evitar que se generen desde el principio de la corrida.

⁷ Considérese el caso de que la temperatura de la pared sea mayor que la del nodo vecino. Existen casos en los que la generación de calor por la reacción química es tal (al menos en el cálculo), que el nodo de la pared se sobrecalienta por este efecto y transfiere una cantidad apreciable de calor al nodo vecino en lo que dura un incremento de tiempo. En estos casos puede suceder que el gradiente de temperaturas se invierta en la vecindad de la pared, de un paso temporal al siguiente, es decir, que inmediatamente resulte que la pared esté a menor temperatura que el nodo inmediato interior. En estos casos la temperatura de la pared evoluciona de un modo que podría verse como una oscilación. Este es un fenómeno diferente al que se quiere estudiar con el número de Biot crítico. Se afirma que esto “aparentemente puede tener significado físico”, porque el fenómeno físico *puede* corresponder a lo descrito, sin embargo, los métodos numéricos se comportan diferente al respecto, por lo que este estudio no permite concluir que ese fenómeno realmente se dé con esos números de Biot particulares.

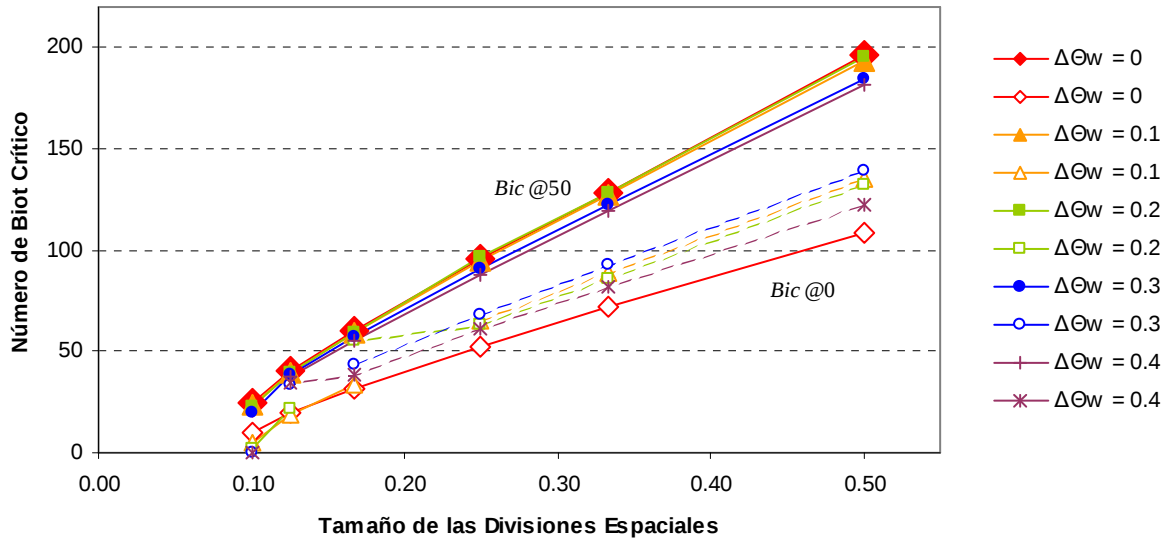


Figura 3.5. Números de Biot críticos en diferencias finitas hacia adelante, en función del tamaño de las divisiones espaciales

La figura 3.6 muestra los números de Biot críticos del método de Crank-Nicolson. En este caso los valores obtenidos son un orden de magnitud más grandes que los obtenidos por diferencias finitas hacia adelante y por los demás métodos, es decir, este método es mucho más tolerante que otros a la “perturbación” causada por la diferencia de temperatura de la pared respecto de la resina en el momento inicial. (Recuérdese que los métodos de diferencias finitas hacia atrás y colocación ortogonal nunca oscilan, así como el propio de Crank-Nicolson cuando la pared inicialmente se encuentra a la misma temperatura que la resina).

La aparente inconsistencia entre las diferentes líneas puede deberse al método que se siguió para la determinación de los números de Biot críticos (ver Anexo V)⁸.

La figura 3.7 muestra los resultados obtenidos con el método de elementos finitos lineales. En este caso los valores de $Bi_c@50$ son prácticamente independientes de la magnitud del $\Delta\Theta_w$, o muestran una ligerísima tendencia a disminuir a medida que aumenta esta variable. En el caso de $Bi_c@0$ se presenta un fenómeno *diferente* al que se describió para diferencias finitas hacia adelante. En esta gráfica la porción de líneas punteadas muestra los casos en los que es posible lograr que no exista oscilación en la temperatura de la pared, pero a pesar de ello existe una oscilación interna de la temperatura, al inicio, completamente carente de significado físico. Con $\Delta\Theta_w = 0.2$ o mayor es imposible en algunos casos eliminar esta oscilación interna

⁸ Para la determinación de los números de Biot críticos sólo se consideraron cuatro decimales de la temperatura para determinar si existía oscilación y tres cifras significativas en el valor del Bi_c . En este método particular se observaron oscilaciones persistentes hasta en la octava cifra decimal. El trabajo de eliminar oscilaciones de la magnitud 10^{-8} hubiese sido enorme, e inconsistente con lo que resultó más que suficiente para los demás métodos. Si se eliminan las oscilaciones de esa magnitud se encuentran números de Biot críticos mucho más pequeños para el método de Crank-Nicolson.

conforme avanza el tiempo. En estos casos las líneas están truncadas hasta el valor que permitió los resultados sin oscilación interna.

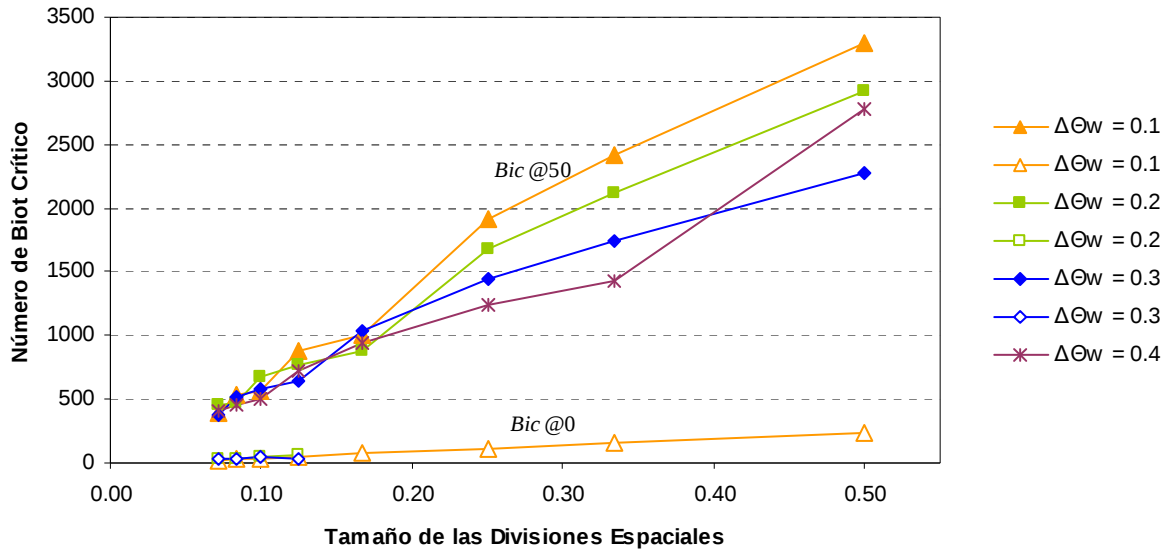


Figura 3.6. Números de Biot críticos en el método de Crank-Nicolson, en función del tamaño de las divisiones espaciales

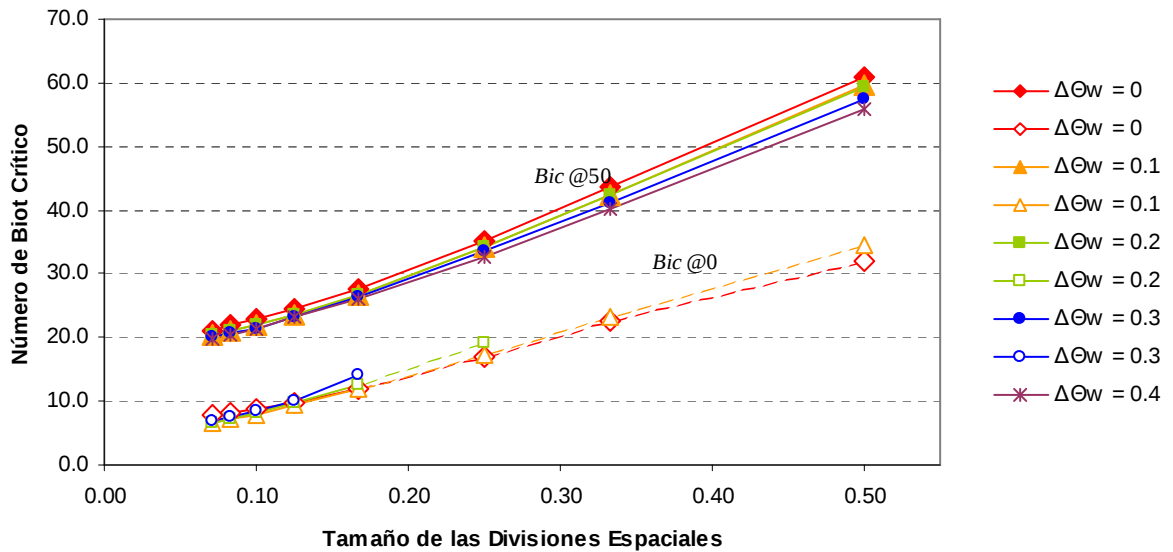


Figura 3.7. Números de Biot críticos en el método de elementos finitos lineales, en función del tamaño de las divisiones espaciales

La figura 3.8 contiene los resultados obtenidos con el método de elementos finitos de segundo grado. En este caso sigue vigente la tendencia general a encontrar valores de $Bi_c@50$ casi independientes del valor de $\Delta\Theta_w$. Un análisis más fino indica que el caso con $\Delta\Theta_w = 0$ es un poco mayor que el de $\Delta\Theta_w \neq 0$, pero los valores obtenidos para estos casos se superponen entre sí en forma más notable que lo encontrado con los métodos numéricos anteriores.

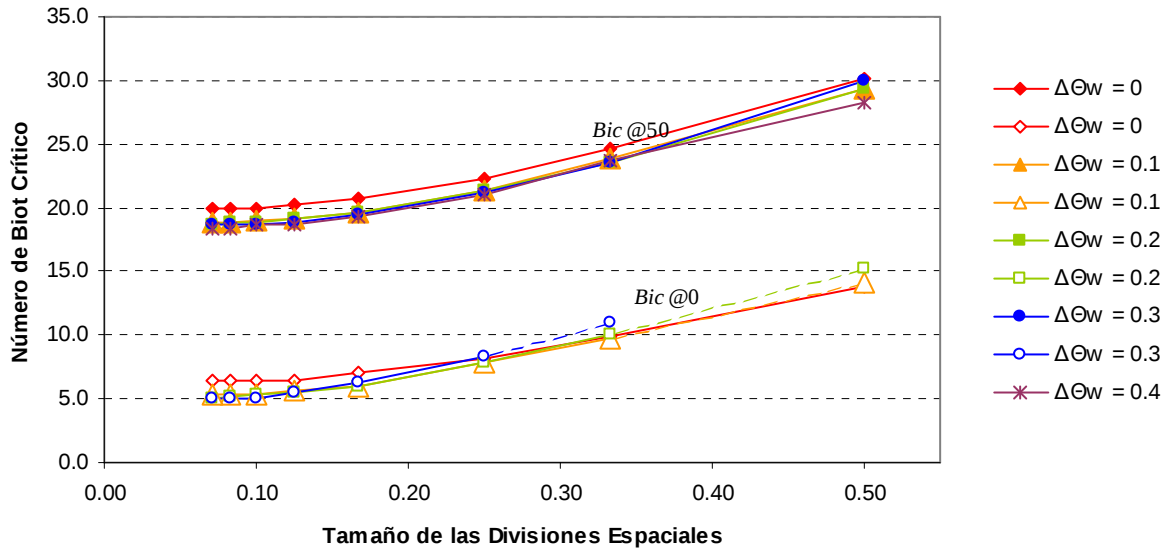


Figura 3.8. Números de Biot críticos en el método de elementos finitos de segundo grado, en función del tamaño de las divisiones espaciales

La porción de líneas punteadas de la figura 3.8, el caso de $Bi_c@0$, tiene el mismo significado que en el método de elementos finitos lineales: en estos casos se produce una oscilación interna en las temperaturas independientemente de que se logre eliminar la oscilación en la temperatura de la pared y un caso se encuentra truncado porque es imposible realizar la simulación sin oscilación interior.

La figura 3.9 muestra los números de Biot críticos del método de elementos finitos con polinomios de Hermite. En este caso sólo se reportan $Bi_c@50$ para los casos con 6 nodos o más (divisiones espaciales de 0.17 o menores). En las corridas realizadas con 4, 3 y 2 nodos no se encontró ningún valor para el cual la temperatura de la pared oscilara al llegar a 50 iteraciones. Para estos casos el $Bi_c@50$ puede considerarse infinito. Se observa, en forma similar a la figura anterior, que el caso con $\Delta\Theta_w = 0$ es un poco mayor que los de $\Delta\Theta_w \neq 0$ y que estos casos prácticamente están superpuestos entre sí.

En lo que corresponde al $Bi_c@0$ se observa un fenómeno similar a los otros dos métodos de elementos finitos, en que existe una oscilación interna que aparece aunque se logre eliminar la oscilación de la temperatura de la pared. Estos casos se indican por líneas punteadas. Asimismo, las líneas están truncadas en el valor máximo que permitió realizar el cálculo completo.

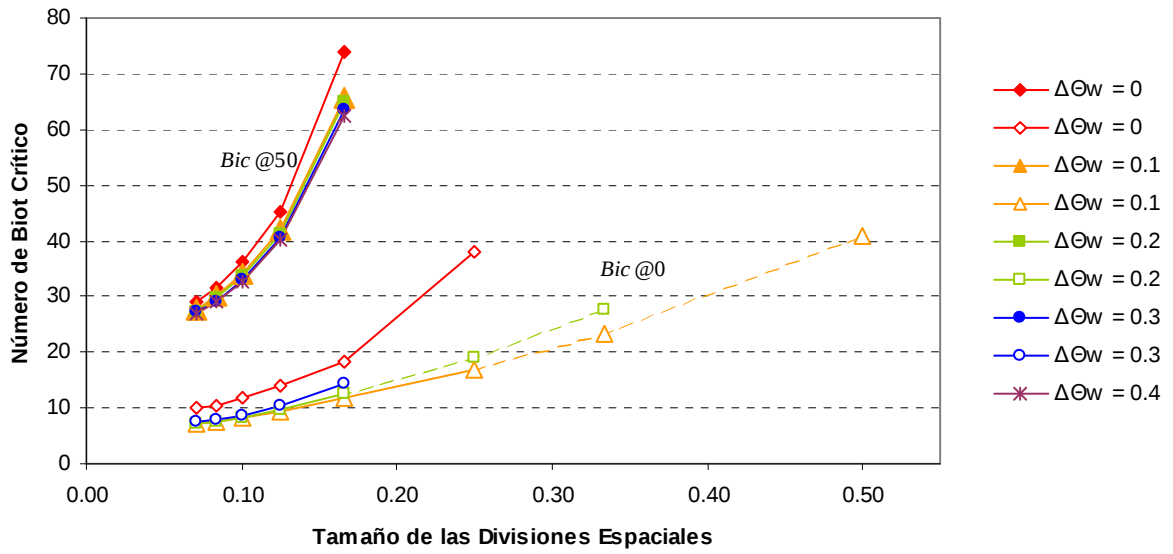


Figura 3.9. Números de Biot críticos en el método de elementos de Hermite, en función del tamaño de las divisiones espaciales

El hecho de que el Bi_c no dependa fuertemente del $\Delta\Theta_w$ invita a obtener los valores promedio para los diferentes $\Delta\Theta_w$ y graficarlos en función del tamaño de las divisiones espaciales, ΔZ . La figura 3.10 muestra los valores medios del $Bi_c@50$ para todos los métodos que oscilan. Como puede observarse, después del método de colocación ortogonal y diferencias finitas hacia atrás, que no oscilan, el método más estable respecto del $Bi_c@50$ es el de Crank-Nicolson (que no aparece en la figura 3.10 porque los Bi_c son un orden de magnitud más grandes; ver figura 3.6) y dicha estabilidad va disminuyendo en el siguiente orden: elementos finitos de Hermite (que a la derecha del intervalo graficado “se va hasta infinito”), diferencias finitas hacia adelante, elementos finitos lineales y elementos finitos de segundo grado. La estabilidad relativa del método de elementos finitos con polinomios de Hermite puede estar relacionado con el hecho de que resuelve simultáneamente la derivada (gradiente de temperatura en cada nodo espacial y temporal), como se explicó en el Capítulo II.

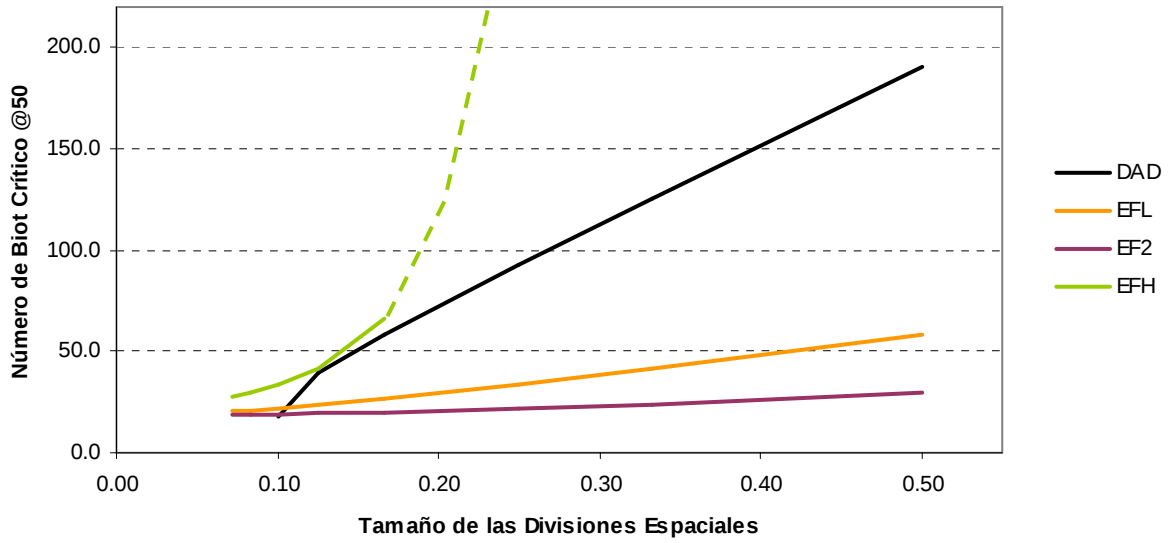


Figura 3.10. Número de Biot crítico a 50 iteraciones, de diferentes métodos, en función del tamaño de las divisiones espaciales

Número de Biot Crítico como Función del Tamaño de Paso Temporal

El estudio de la sección anterior se realizó con tamaño de paso adimensional constante, $\Delta\tau = 0.005$, que es una magnitud útil para la reacción estudiada. Para investigar la dependencia del Bi_c respecto de la magnitud del $\Delta\tau$, se hicieron determinaciones adicionales de Bi_c con tamaños de paso $\Delta\tau = 0.00125$, 0.0025 y 0.01 . Las figuras 3.11 a 3.14 muestran los resultados obtenidos. Los valores numéricos se encuentran en el Anexo V. Se observó que, en todos los métodos, el Bi_c disminuye al aumentar la magnitud del $\Delta\tau$. Como en algunos casos era evidente la proporcionalidad inversa entre Bi_c y $\Delta\tau$, se decidió hacer el tratamiento que se describe a continuación.

El hecho esperado de que el Bi_c sea inversamente proporcional al $\Delta\tau$ elevado a una potencia b (constante) se expresa en la forma:

$$Bi_c = \frac{c}{(\Delta\tau)^b} \quad (3.6)$$

donde c es una constante de proporcionalidad. Aplicando logaritmos a ambos lados de esta expresión se obtiene:

$$\ln Bi_c = \ln c - b \ln \Delta\tau \quad (3.7)$$

que es la expresión de una recta con intercepto en $\ln c$ y pendiente $-b$, en coordenadas logarítmicas. De aquí se sigue que, si al graficar Bi_c vs. $\Delta\tau$ en coordenadas logarítmicas se obtiene una recta con pendiente negativa, significa que se cumple la proporcionalidad inversa de la ecuación (3.6). En el caso particular de que b tenga valor unitario, se cumplirá que el valor de Bi_c es inversamente proporcional a $\Delta\tau$.

Esta es la razón por la que las figuras 3.11 a 3.14 tienen coordenadas logarítmicas en ambos ejes. Las conclusiones que pueden obtenerse de estas figuras son las siguientes:

- a) Por el hecho de haber obtenido líneas rectas en todos los métodos que oscilan, excepto en elementos finitos de Hermite, se concluye que el Bi_c es inversamente proporcional a $\Delta\tau$ elevado a una potencia positiva (es decir, se cumplen las ecuaciones (3.6) y (3.7)).
- b) En los métodos de diferencias finitas hacia adelante y elementos finitos lineales, dicha potencia es independiente del tamaño de las divisiones espaciales, ΔZ . Esto se deduce del hecho de que, con estos métodos, se obtienen un conjunto de rectas paralelas. (Lo mismo podría afirmarse del método de Crank-Nicolson, pero se omite la gráfica por las dificultades mostradas en la figura 3.6 y la explicación de la nota 6).
- c) En el caso particular de diferencias finitas hacia adelante, dichas rectas paralelas tienen pendiente $-b = -1$, por lo que se concluye que, para este método, el Bi_c es inversamente proporcional a $\Delta\tau$.
- d) En todos los demás métodos que oscilan, $b < 1$.

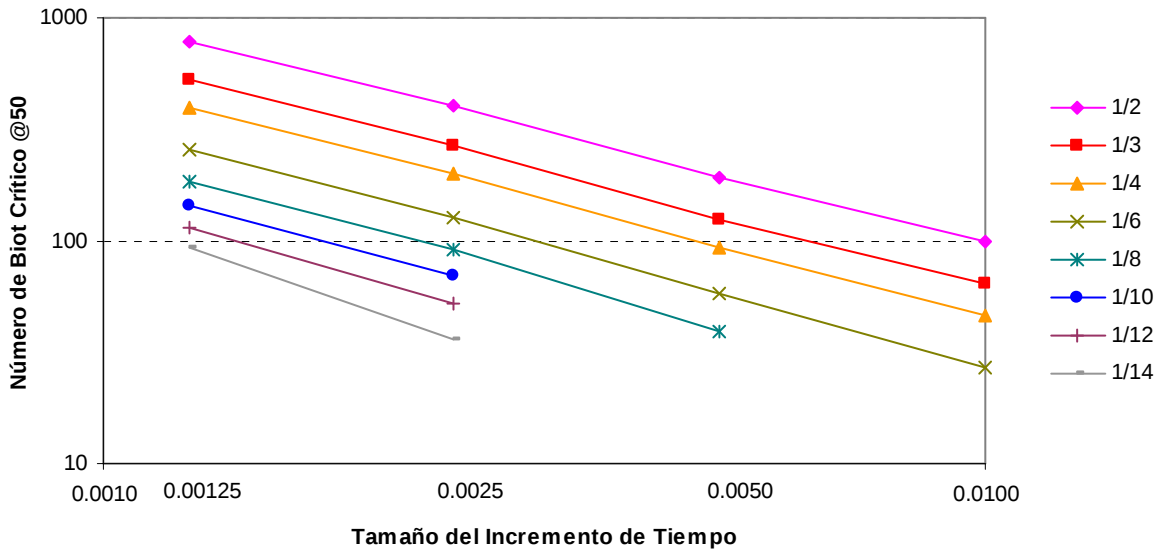


Figura 3.11. Números de Biot críticos a 50 iteraciones en diferencias finitas hacia adelante, en función del tamaño de paso temporal, para diferentes tamaños de divisiones espaciales

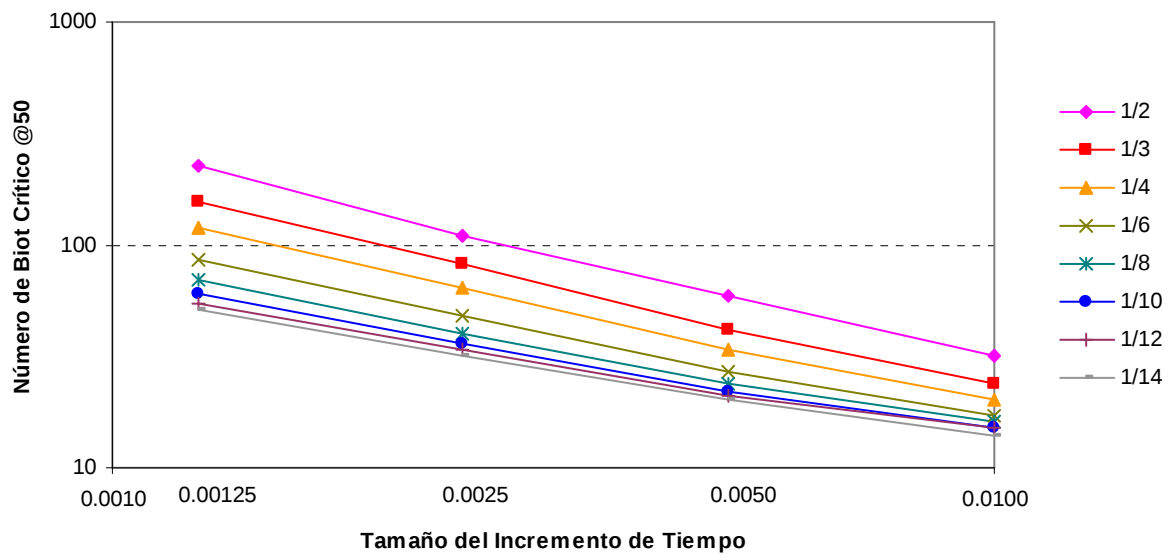


Figura 3.12. Números de Biot críticos a 50 iteraciones en elementos finitos lineales, en función del tamaño de paso temporal, para diferentes tamaños de divisiones espaciales

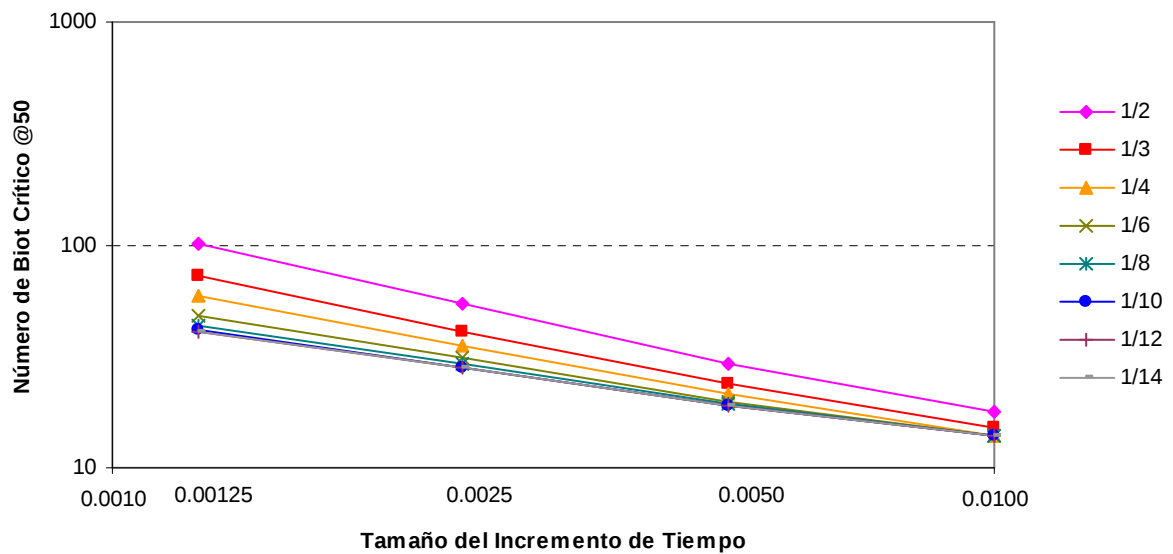


Figura 3.13. Números de Biot críticos a 50 iteraciones en elementos finitos de segundo grado, en función del tamaño de paso temporal, para diferentes tamaños de divisiones espaciales

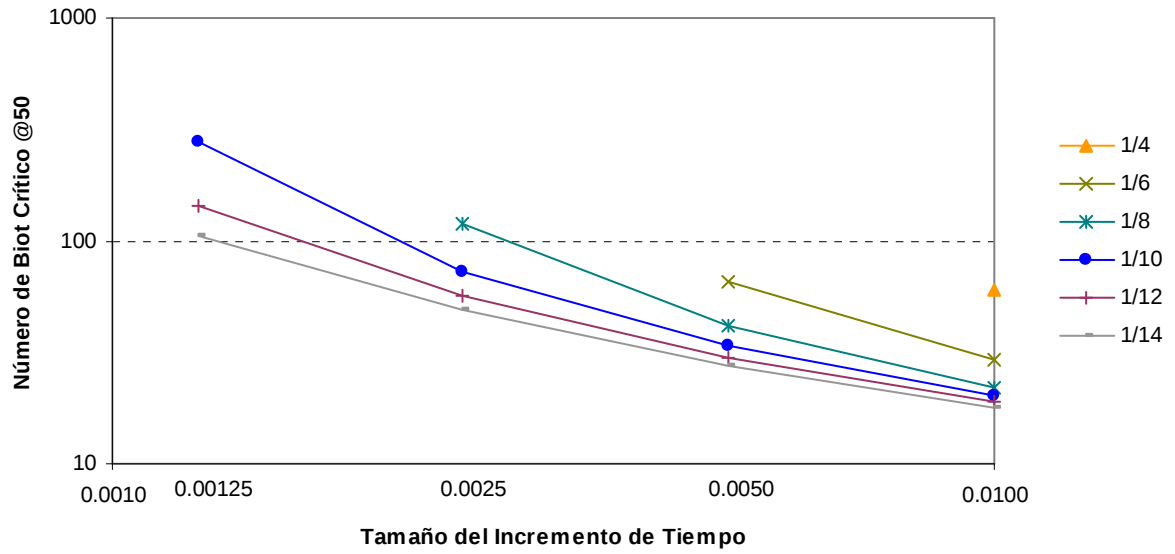


Figura 3.14. Números de Biot críticos a 50 iteraciones en elementos finitos de Hermite, en función del tamaño de paso temporal, para diferentes tamaños de divisiones espaciales

Otras Causas de Divergencia

Además del exceso de generación interna y de la oscilación causada por la transferencia de calor en la pared, existen otras causas de divergencia. Concretamente, el método de diferencias finitas hacia adelante requiere que el valor del incremento de tiempo esté relacionado con la separación espacial de los nodos. Como se mencionó en el Capítulo II, en el caso de la ecuación de calor sin generación interna, se ha encontrado que el cociente $\delta = \Delta\tau/(\Delta Z)^2$ debe ser menor que $\frac{1}{2}$ para que exista convergencia. En el caso del problema con generación interna se observó un requerimiento semejante. Aunque no se hizo una determinación precisa del valor de δ , sí se observó una tendencia de las temperaturas a oscilar en todo el dominio espacial –independientemente de la oscilación en los nodos cercanos a la pared, debida a un $Bi > Bi_c$ – con una amplitud creciente y agravada por el efecto de la generación interna. La figura 3.15 muestra lo sucedido en este caso.

Como la recomendación general es usar $\delta < 1/2$ y preferiblemente $\delta = 1/6$ (Capítulo II), en la práctica esta restricción recae sobre la magnitud del incremento de tiempo adimensional, $\Delta\tau$. Para un número dado de nodos espaciales separados por una distancia ΔZ , debe cumplirse que $\Delta\tau < (\Delta Z)^2/2$. Como se mencionó en una sección anterior, el error asociado con la generación interna está fuertemente relacionado con la magnitud del $\Delta\tau$. En la mayoría de los casos se encontró que al dar un tamaño de paso “suficientemente pequeño” como para mantener el error por generación interna relativamente pequeño, automáticamente se cumple la restricción $\delta < \frac{1}{2}$. Por esta razón, exceptuando los casos con muchos nodos espaciales, generalmente no se tuvo problema con el valor de δ en diferencias finitas hacia adelante.

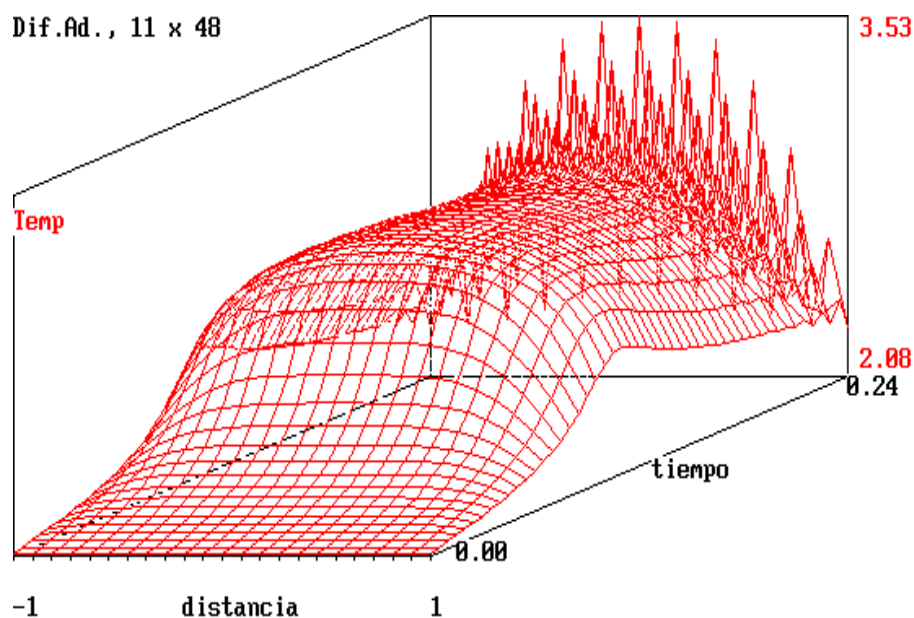


Figura 3.15. Divergencia de los resultados dentro del dominio espacial, en diferencias hacia adelante, debido a un valor de δ demasiado grande

Comparación de Resultados

En las secciones anteriores quedó claro que, a excepción de los métodos de diferencias finitas hacia atrás y de colocación ortogonal, en general existe un valor crítico para el número de Biot. Si se simula un sistema con $Bi > Bi_c @ 0$, la temperatura de la pared oscila. A consecuencia de esto, sólo es posible simular una pared isotérmica mediante el empleo de la condición frontera (1.20) y un Bi “muy grande” cuando se utilizan los métodos de diferencias finitas hacia atrás y colocación ortogonal. Adicionalmente, también es posible hacerlo en algunos otros casos particulares ya mencionados, como el caso de Crank-Nicolson si la $\Delta\Theta_w = 0$ y con elementos finitos de Hermite, si ΔZ es mayor que cierto valor mínimo requerido (es decir, no se puede tener una malla muy cerrada). La tabla 3.1 muestra un resumen de las posibilidades de modelar una pared isotérmica como se ha descrito.

Tabla 3.1. Posibilidades de simular una pared isotérmica usando la condición de frontera (1.20) y un número de Biot muy grande		
Método	$\Delta\Theta_w = 0$	$\Delta\Theta_w > 0$
Diferencias finitas hacia adelante	no	no
Diferencias finitas hacia atrás	sí	sí
Método de Crank-Nicolson	sí	no
Colocación ortogonal	sí	sí
Elementos finitos lineales	no	no
Elementos finitos de segundo grado	no	no
Elementos finitos de Hermite	cond.	cond.

Con cualquiera de los métodos que oscilan podría modelarse una pared isotérmica si se cambiara la condición frontera y se impusiera la condición $\Theta = \Theta_p = \text{constante}$ en $Z = 1$ para toda $\tau > 0$. Sin embargo, esto implicaría la modificación de las matrices correspondientes a cada método, específicamente para resolver el caso particular de la pared isotérmica. En el trabajo de comparación de los métodos numéricos esto se vio como una inconveniencia porque sería “forzar” una condición de estabilidad para simular un caso particular. Esto se suma a la observación experimental de que es prácticamente imposible lograr una pared isotérmica durante una polimerización estática [Lee y Macosko, 1980; Macosko, 1989]. Esto dio origen a la idea de que una comparación general entre los métodos numéricos debería hacerse mediante un caso que sí incluyera transferencia de calor en la pared, pero sin que ésta fuera isotérmica. Para esto había que escoger un número de Biot que no produjera oscilación en ningún método. Observando las gráficas anteriores y/o sus datos correspondiente en el Anexo V, se llega a la conclusión de que $Bi = 5$ es un valor adecuado para lograr la no-oscilación con todos los métodos.

Para efectuar la comparación de resultados, es necesario definir un método de referencia. La no-oscilación de los resultados es un indicador de buena estabilidad, pero no garantiza que los resultados tengan menor error. En trabajos anteriores se escogió arbitrariamente como referencia el método de colocación ortogonal con nueve puntos interiores y empleando un paso temporal igual a la mitad del empleado en el método por comparar [Hermosillo y González-Romero, 1989, I y II]. En esos casos las comparaciones se hicieron siguiendo únicamente los resultados en el centro y en la pared del molde. Sin embargo, el desarrollo completo del programa descrito en el Anexo III permitió posteriormente diseñar una nueva estrategia de comparación, que se describe a continuación.

Aunque el programa permite efectuar comparaciones (es decir, cálculos de error, error medio y EPAM) para la temperatura, la conversión y la generación de calor interna, por separado, se decidió comparar únicamente los resultados de las temperaturas, ya que los demás resultados se encuentran, en cierta forma, implícitos en éstas. En el caso del método de colocación ortogonal las comparaciones se hicieron no con los resultados “originales” que produce el método, sino con los resultados interpolados a nodos equidistantes en el espacio, utilizando para la interpolación los polinomios ortogonales correspondientes. La estrategia de comparación fue la siguiente:

1. **Comparación con la solución analítica.** El caso analítico tiene pared isotérmica y $\Delta\Theta_w = 0$ (ver Capítulo I al final). Según los resultados de la tabla 3.1, este caso puede aproximarse solamente por los métodos de diferencias finitas hacia atrás, Crank-Nicolson, colocación ortogonal y elementos finitos de Hermite con pocos nodos espaciales. Por tanto, el primer paso sería comparar los resultados obtenidos por estos métodos con los resultados de la solución analítica y de ahí escoger el más exacto. El “mejor” método sería el que diera el menor EPAM, considerando todos los nodos espaciales y temporales.
2. **Comparación de un caso con pared isotérmica.** Como se explicó en el Capítulo I, la solución analítica no corresponde a una polimerización estática porque considera la generación de calor constante. Los mismos métodos del apartado anterior permiten simular una reacción de orden n . Habiendo escogido “el mejor” método del apartado anterior, se haría una comparación –con base en el EPAM– respecto de éste, empleando malla más

densa en tiempo y espacio, de un caso con pared isotérmica usando $Bi = 10^6$. De aquí podría encontrarse que “el mejor” método en el caso de polimerizaciones estáticas fuera otro diferente del escogido en el apartado anterior. Estas corridas se harían conservando la condición del caso anterior, $\Delta\Theta_w = 0$ (activación por mezclado, como en las figuras 1.7 y siguientes).

- 3. Comparación de un caso general con $Bi = 5$.** La comparación de todos los métodos requiere un número de Biot que no produzca oscilación en ningún caso. En este apartado se compararía todos los métodos respecto del “mejor” escogido en el apartado anterior, usando $Bi = 5$ y calculando el EPAM con todos los nodos espaciales y temporales.

En las siguientes secciones se describe con detalle lo que se encontró al seguir este plan de comparación.

Comparación con la Solución Analítica

Se calculó el EPAM de diferencias finitas hacia atrás, del método de Cranck-Nicolson, de colocación ortogonal y de elementos finitos de Hermite, respecto de la solución analítica, empleando 2, 3, 4, 6, 8, 10, 12 y 14 nodos espaciales e incrementos de tiempo $\Delta\tau = 0.005$ y 0.0025 . La figura 3.16 muestra los resultados obtenidos (tabulados en el Anexo V). Las conclusiones que se obtienen de esta información son las siguientes:

- a) El método que produce menor error es el de elementos finitos de Hermite, pero sólo funciona con 4 nodos o menos en el caso de $\Delta\tau = 0.005$ y con 6 nodos o menos en el caso de $\Delta\tau = 0.0025$. Por esta razón, el método de elementos finitos con polinomios de Hermite no puede escogerse como método de referencia.
- b) El método de colocación ortogonal produce un error grande si se usan dos divisiones espaciales (un solo nodo interior), pero disminuye rápidamente si se usan 3 a 5 divisiones espaciales (2 a 4 nodos interiores). El beneficio que se obtiene por el uso de más nodos interiores es marginal.
- c) El método que da menor EPAM a medida que aumenta el número de nodos es el de Crank-Nicolson y dicho error siempre disminuye al aumentar el número de nodos. Esto hace que el método de Crank-Nicolson sea el favorito para servir de referencia en las comparaciones posteriores.
- d) Cuando se tiene más de cierto número de nodos espaciales, el beneficio que se obtiene por aumentar el número de nodos es menor que el que se obtiene por disminuir el tamaño de paso temporal. Esto se acentúa por el hecho de que duplicar el número de nodos temporales implica duplicar el trabajo de cómputo, mientras que duplicar el número de nodos espaciales implica aproximadamente cuadruplicar el trabajo de cómputo.

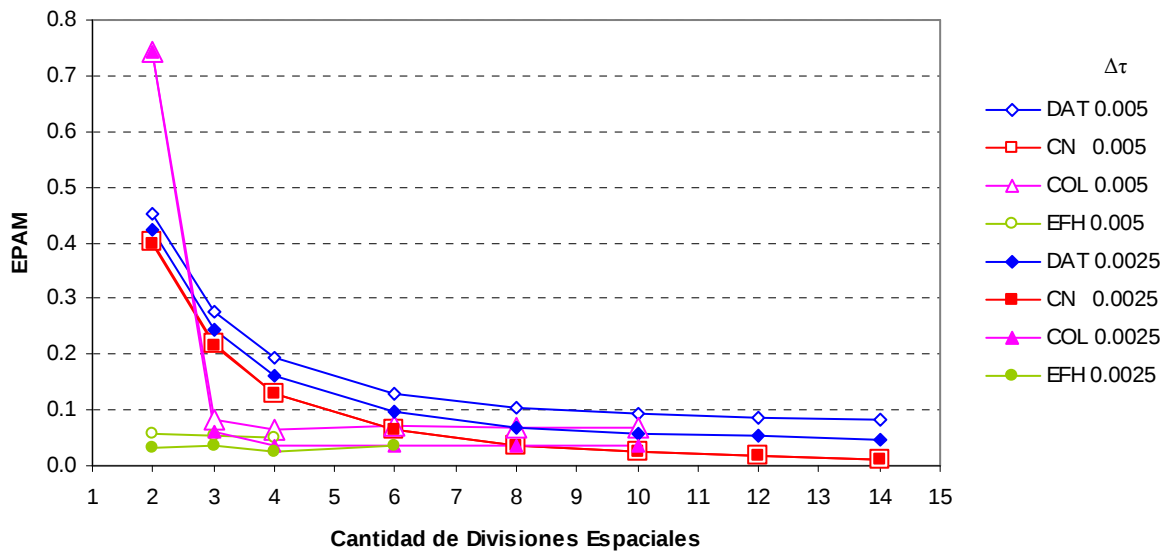


Figura 3.16. EPAM de diferentes métodos respecto de la solución analítica, en función de la cantidad de divisiones espaciales

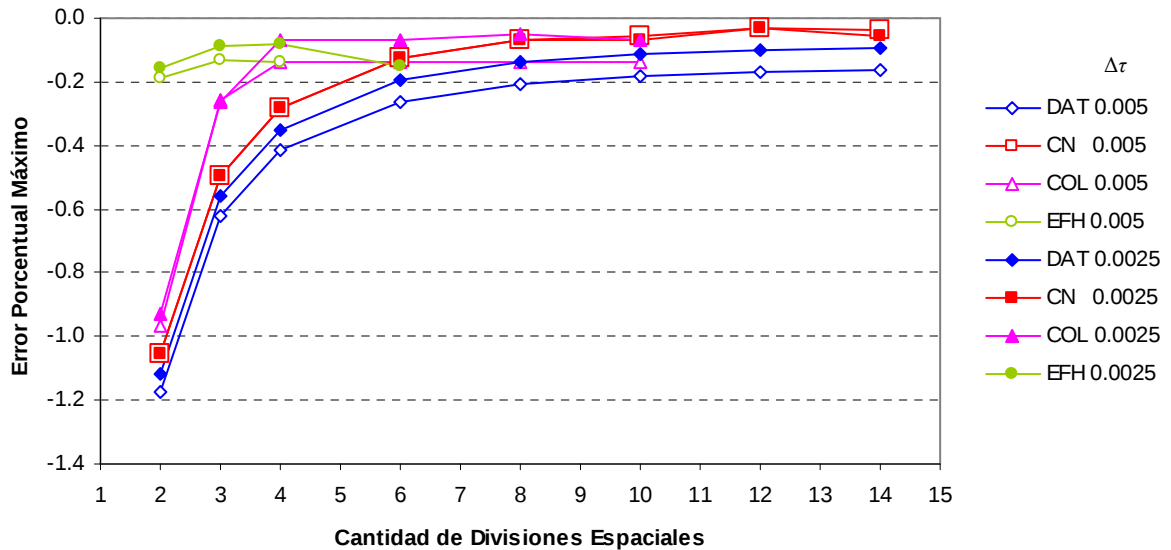


Figura 3.17. Error porcentual máximo respecto de la solución analítica, en función del número de nodos espaciales

Aunque el criterio de decisión para escoger un método de referencia fue el EPAM, también se hizo la comparación de los métodos teniendo como criterio el error máximo obtenido. Estos resultados se encuentran en la figura 3.17 (datos en el Anexo V). Obsérvese que el comportamiento de los métodos respecto de lo mostrado en esta figura es cualitativamente similar a la información de la figura 3.16. Esto refuerza las observaciones hechas en el párrafo anterior. Las anomalías aparentes en las tendencias, que se presentan en el método de

elementos finitos de Hermite, así como en el de Crank-Nicolson se deben a que conforme el error porcentual máximo disminuye, destacan errores en otras regiones del dominio espacio-temporal. Esto puede ejemplificarse en la figura 3.18, que muestra la distribución espacio-temporal del error porcentual en temperatura, del método de Crank-Nicolson respecto de la solución analítica, para el caso con 13 divisiones espaciales y $\Delta\tau = 0.005$. (Nótese que los errores para este caso son muy pequeños: el máximo, en valor absoluto, es 0.03%). En esta figura se aprecian unos pequeños “picos” en la zona de tiempo muy pequeño. A medida que se tienen errores porcentuales menores en todo el dominio, estos picos iniciales pueden llegar a representar el error porcentual máximo. En estas condiciones las tendencias mostradas en la figura 3.17 muestran las alteraciones indicadas.

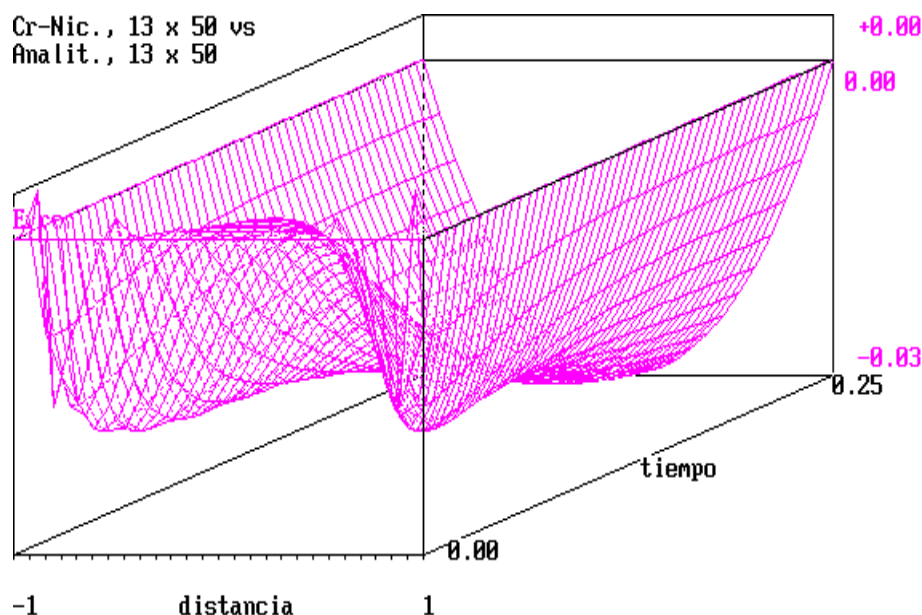


Figura 3.18. Error porcentual del método de referencia (Crank-Nicolson) respecto de la solución analítica, en función de la distancia y el tiempo

Comparación del Caso con Pared Isotérmica

En esta sección se procedió a hacer el estudio comparativo del caso con pared isotérmica, aplicado a una polimerización estática, para el cual no existe una solución analítica (véanse las figuras 1.4 a 1.6 que corresponden a este caso). Se tomó como referencia el método de Crank-Nicolson con 12 divisiones espaciales e incremento de tiempo $\Delta\tau = 0.0025$. Como el número 12 es múltiplo de 2, 3, 4, 6 y 12, los nodos espaciales equidistantes obtenidos al dividir en 2, 3, 4, 6 y 12 partes coinciden espacialmente con el caso de referencia que tiene 12 divisiones.

Se hicieron corridas para comparación utilizando $\Delta\Theta_w = 0$ (semejante al analítico y correspondiente a activación por mezclado), con incrementos de tiempo $\Delta\tau = 0.0025, 0.005$ y 0.01 . Con estos tamaños de paso temporal todos los nodos temporales también coinciden con los de referencia, condición necesaria para la comparación.

Los resultados de estas comparaciones se muestran en la figura 3.19 (datos en el Anexo V). Las conclusiones que se obtienen de estos datos son las siguientes:

- Todos los métodos comparados producen un EPAM semejante, especialmente cuando el número de divisiones espaciales es mayor que tres.
- Al igual que en la comparación con el caso analítico, pero más evidente, el EPAM se reduce en forma mucho más notable por la disminución del tamaño de paso temporal que por el aumento en el número de nodos espaciales.

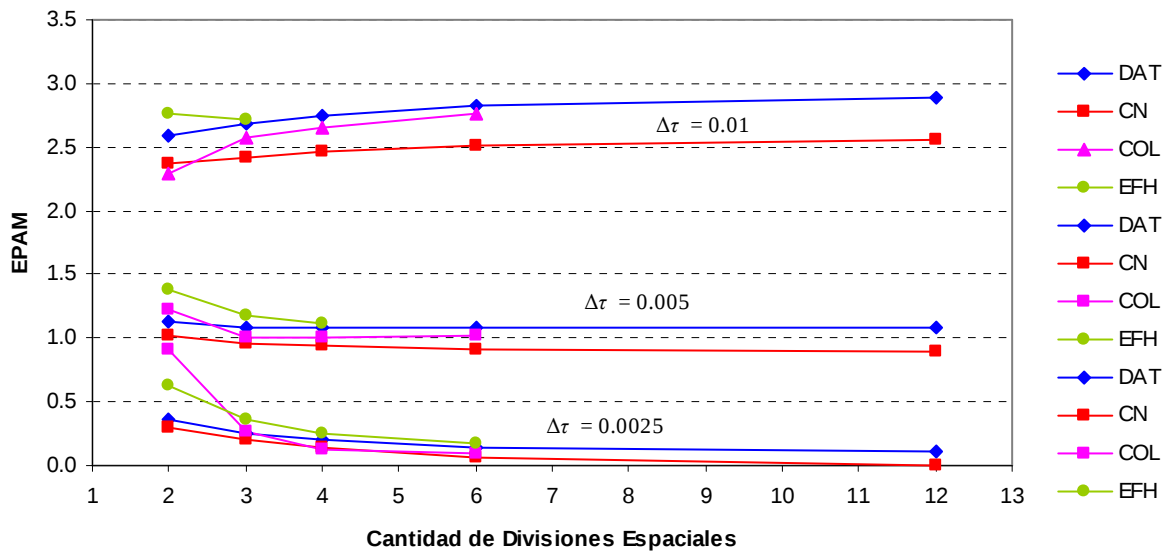


Figura 3.19. EPAM respecto de Crank-Nicolson en función de la cantidad de divisiones espaciales, para diferentes incrementos de tiempo, en el caso de pared isotérmica y $\Delta\Theta_w = 0$

El hecho de que el método de Crank-Nicolson con 12 divisiones espaciales tenga EPAM = 0 indica únicamente que éste es el método de referencia y no que su error respecto de la solución al modelo sea realmente nulo. Algo semejante sucede con los demás métodos que dan resultados parecidos al de Crank-Nicolson cuando se usa $\Delta\tau = 0.0025$. Por lo anterior, probablemente el conjunto de datos más confiable, con objeto de continuar el proceso de selección de un método de referencia, en la figura 3.19, sea el de $\Delta\tau = 0.005$. En los tres conjuntos de datos el método con menor EPAM fue el de Crank-Nicolson. Por esta razón se decidió conservarlo como método de referencia para las demás comparaciones.

Comparación de Casos Generales con Número de Biot = 5

Ante la necesidad de hacer una comparación entre todos los métodos codificados en el programa de cómputo, y las necesidades encontradas para hacer esta comparación con el caso de pared isotérmica, se decidió buscar un número de Biot mayor que cero (no adiabático) pero suficientemente pequeño como para que no hubiera oscilación en la temperatura de la pared en ningún caso. Esto remite a las figuras 3.5 a 3.9 y al Anexo V para buscar el menor $Bi@0$ de todos los métodos. Este se encontró en elementos finitos de segundo grado. Se decidió escoger un Bi ligeramente menor para evitar toda tendencia a oscilar. Así, arbitrariamente, se escogió $Bi = 5$ para estas simulaciones y comparaciones.

Las comparaciones se hicieron usando como método de referencia el de Crank-Nicolson con 12 divisiones espaciales e incrementos de tiempo $\Delta\tau = 0.00125$. Los resultados de referencia en temperatura, conversión y velocidad de generación de calor se encuentran graficados en la figuras 3.20, 3.21 y 3.22 respectivamente, para el caso con $\Delta\Theta_w = 0.3$, lo cual corresponde a un caso real con activación térmica [Lee y Macosko, 1980]. Se hicieron comparaciones de todos los métodos con 2, 3, 4, 6 y 12 divisiones espaciales y utilizando incrementos de tiempo $\Delta\tau = 0.00125, 0.0025$ y 0.005 .

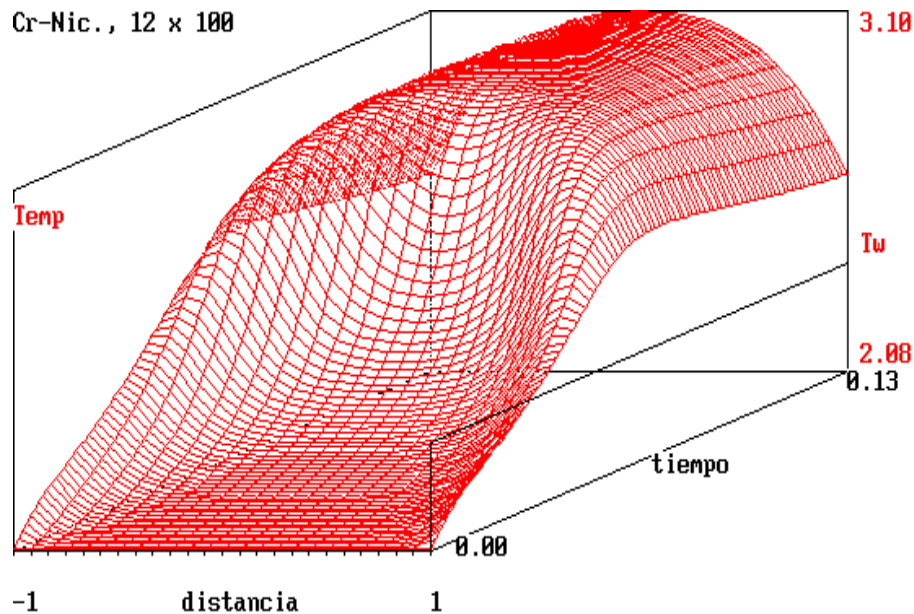


Figura 3.20. Temperatura en función de la distancia y el tiempo, obtenidos con $Bi = 5$ y $\Delta\Theta_w = 0.3$ (resultados de referencia)

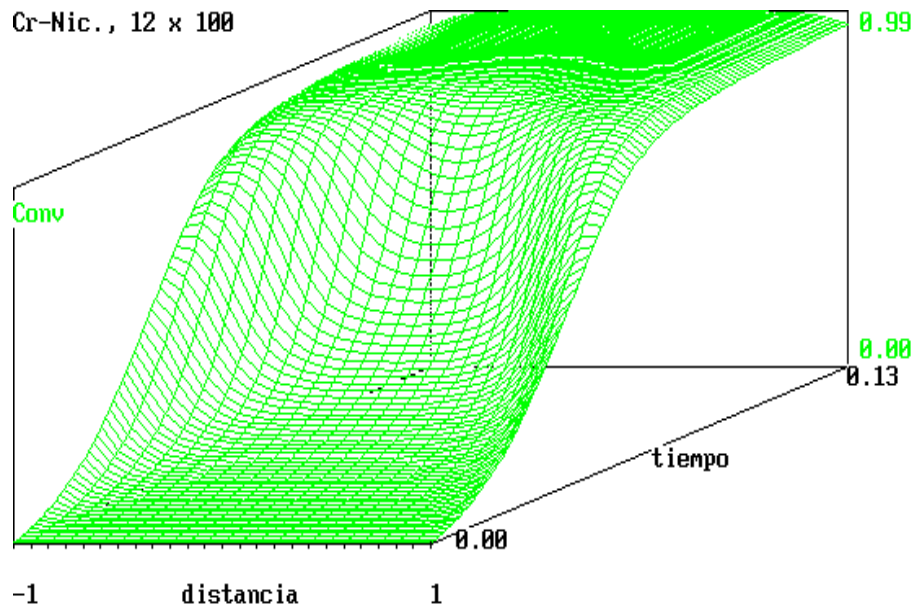


Figura 3.21. Conversión en función de la distancia y el tiempo, obtenidos con $Bi = 5$ y $\Delta\Theta_w = 0.3$

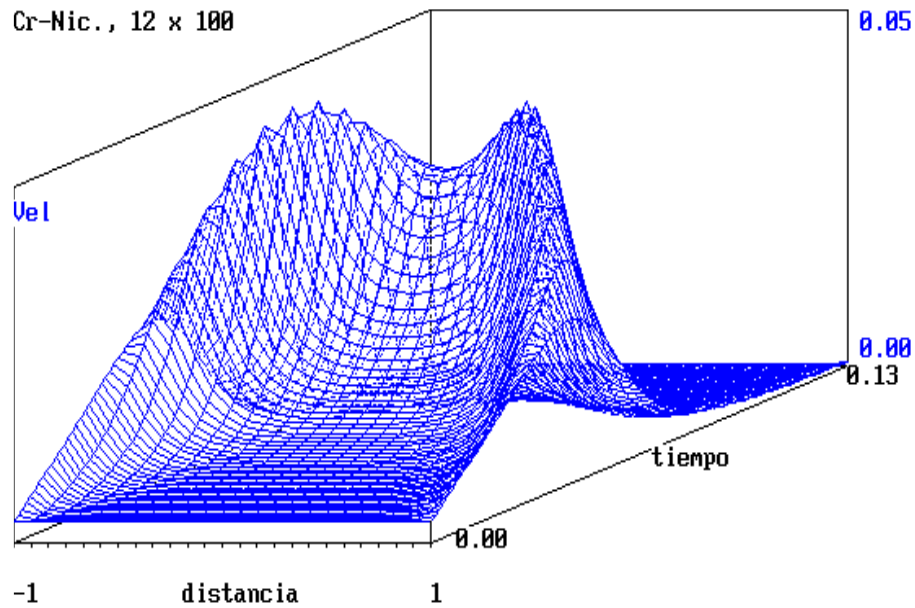


Figura 3.22. Velocidad de generación de calor en función de la distancia y el tiempo, obtenidos con $Bi = 5$ y $\Delta\Theta_w = 0.3$

Las figuras 3.23 a 3.25 muestran los resultados obtenidos de estas comparaciones, utilizando $\Delta\Theta_w = 0.3$, correspondiente a un caso real con activación térmica [Lee y Macosko, 1980]. Las figuras 3.26 a 3.28 muestran los resultados obtenidos utilizando $\Delta\Theta_w = 0$, con todas las demás condiciones iguales, lo cual corresponde al caso de activación por mezclado. Aunque la

evolución de la temperatura, conversión y generación de calor en ambos casos es cualitativamente diferente (ver Capítulo I), las conclusiones que se obtienen en cuanto al comportamiento del EPAM de los diversos métodos numéricos son prácticamente las mismas.

Las conclusiones que se obtienen de estas comparaciones son las siguientes:

- En general, el EPAM disminuye rápidamente con el número de divisiones espaciales, cuando este número es pequeño.
- Con más de cierto número de divisiones espaciales, el EPAM prácticamente no disminuye con el aumento del número de divisiones espaciales (tiende a un valor asintótico). Este valor asintótico es el
- En las condiciones del inciso anterior es más conveniente disminuir el tamaño de paso en tiempo. EPAM que se obtendría en caso adiabático ($Bi = 0$ y todo lo demás igual), representado en las gráficas con la línea horizontal denominada “adb”.

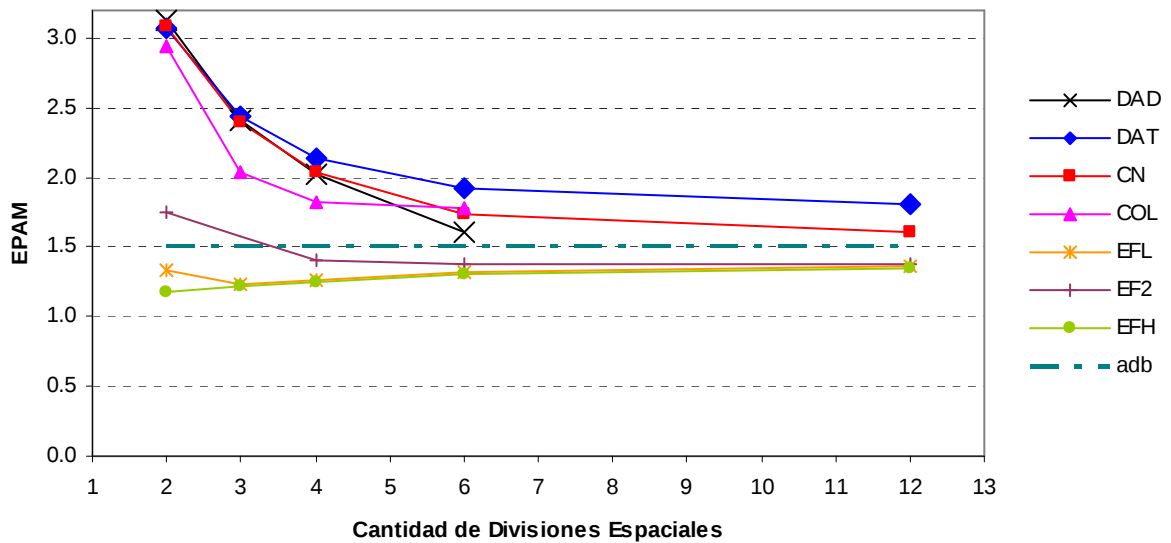


Figura 3.23. EPAM de los diversos métodos con $\Delta\tau = 0.005$ y $\Delta\Theta_w = 0.3$ en función de la cantidad de divisiones espaciales
Referencia: Crank-Nicolson con 12 divisiones espaciales y $\Delta\tau = 0.00125$

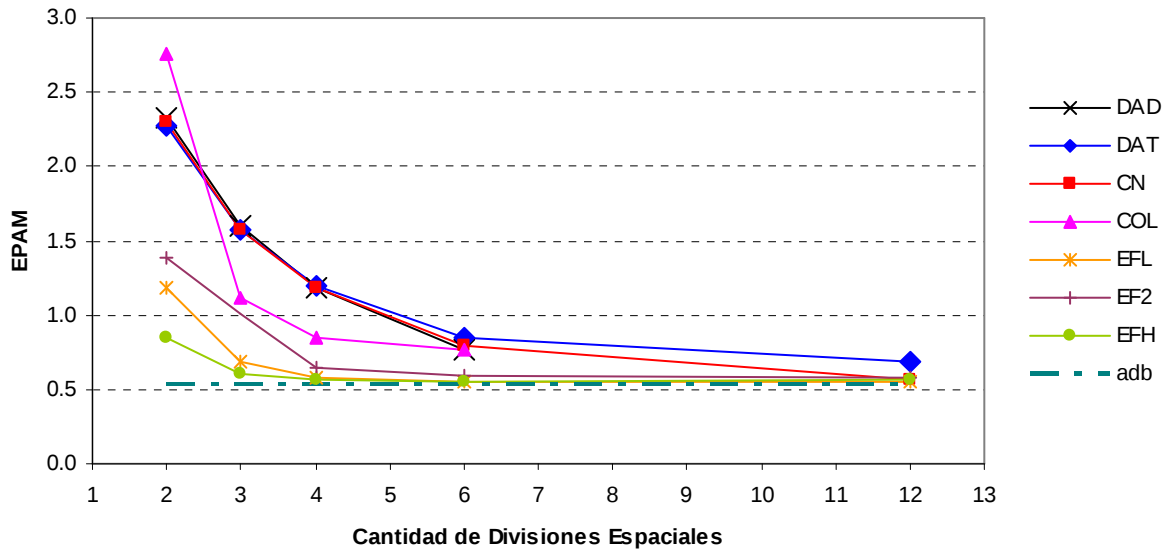


Figura 3.24. EPAM de los diversos métodos con $\Delta\tau = 0.0025$ y $\Delta\Theta_w = 0.3$ en función de la cantidad de divisiones espaciales
Referencia: Crank-Nicolson con 12 divisiones espaciales y $\Delta\tau = 0.00125$

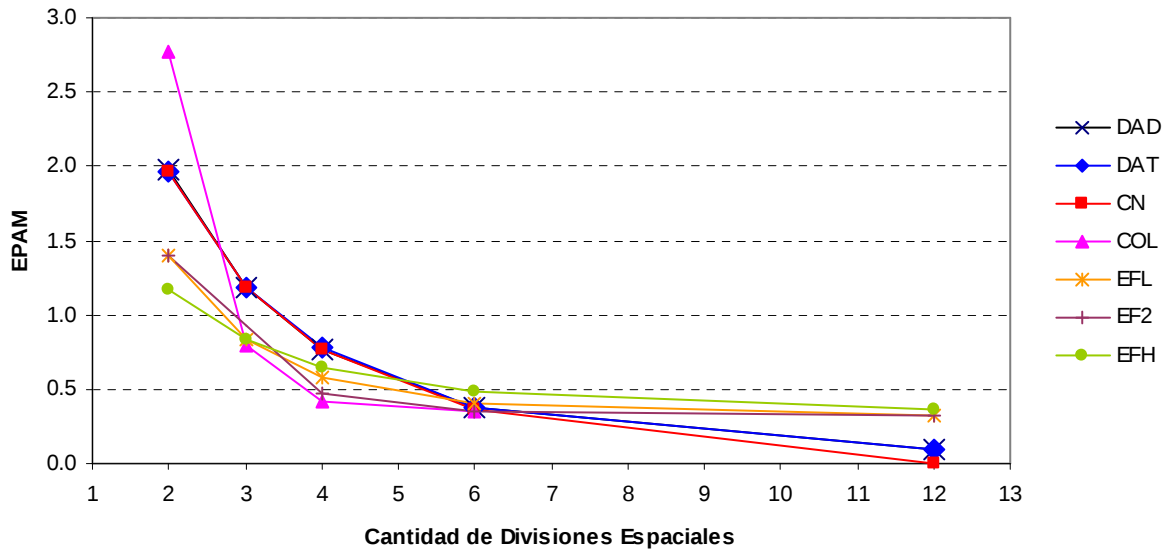


Figura 3.25. EPAM de los diversos métodos con $\Delta\tau = 0.00125$ y $\Delta\Theta_w = 0.3$ en función de la cantidad de divisiones espaciales
Referencia: Crank-Nicolson con 12 divisiones espaciales y $\Delta\tau = 0.00125$

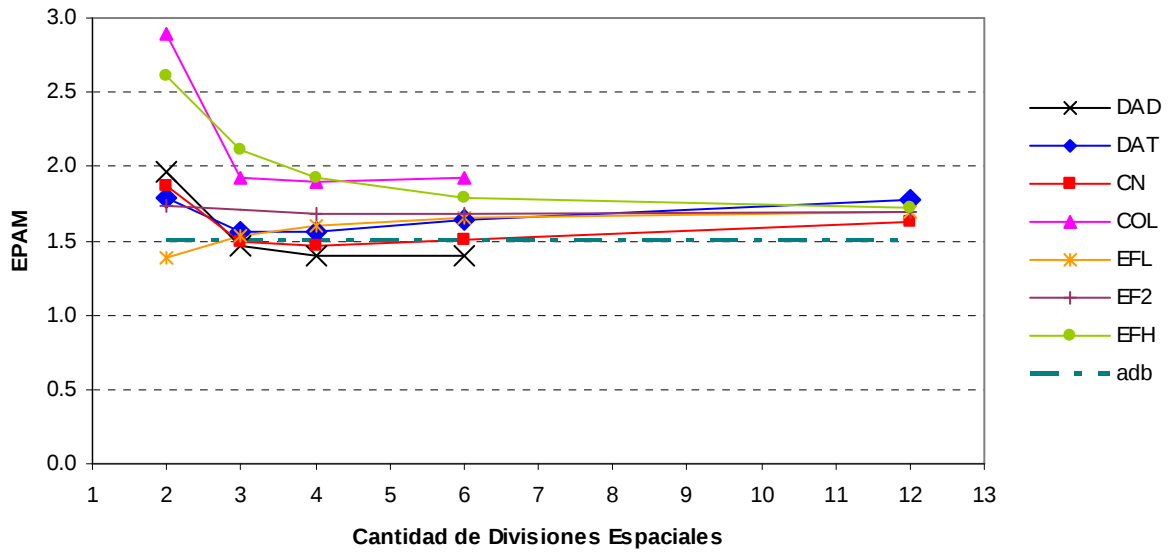


Figura 3.26. EPAM de los diversos métodos con $\Delta\tau = 0.005$ y $\Delta\Theta_w = 0$ en función de la cantidad de divisiones espaciales
Referencia: Crank-Nicolson con 12 divisiones espaciales y $\Delta\tau = 0.00125$

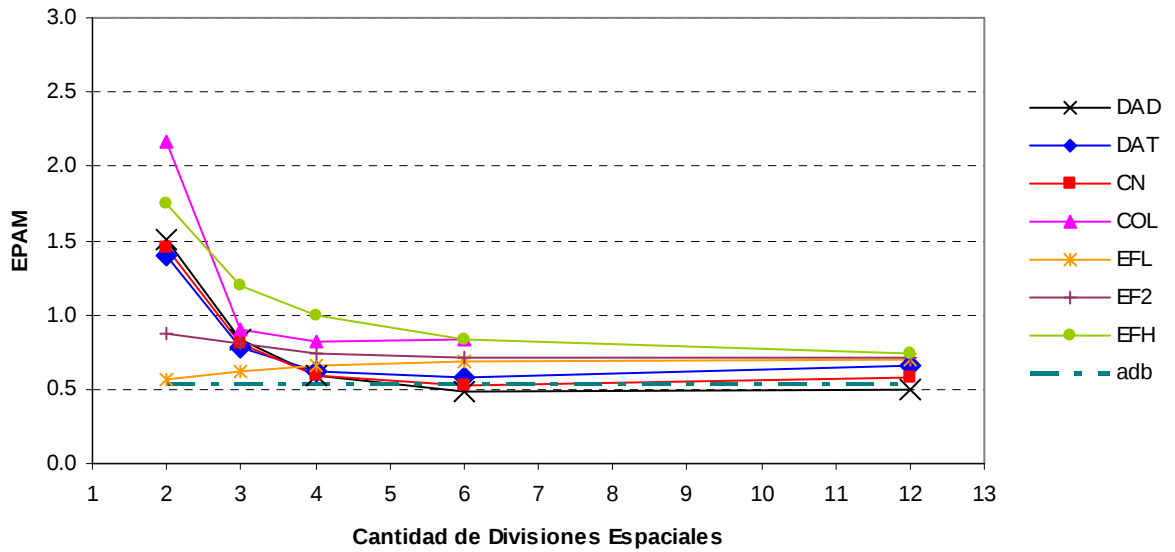


Figura 3.27. EPAM de los diversos métodos con $\Delta\tau = 0.005$ y $\Delta\Theta_w = 0$ en función de la cantidad de divisiones espaciales
Referencia: Crank-Nicolson con 12 divisiones espaciales y $\Delta\tau = 0.00125$

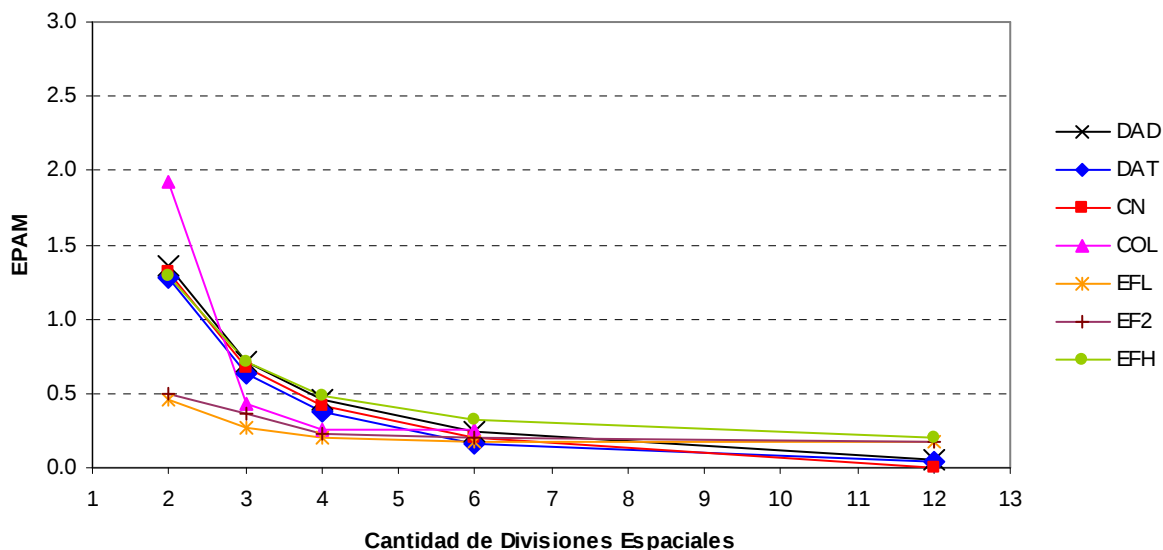


Figura 3.28. EPAM de los diversos métodos con $\Delta\tau = 0.005$ y $\Delta\Theta_w = 0$ en función de la cantidad de divisiones espaciales
Referencia: Crank-Nicolson con 12 divisiones espaciales y $\Delta\tau = 0.00125$

La conclusión (b) del párrafo anterior merece un análisis más detallado. Las causas de error en la solución de la ecuación de calor con generación interna pueden dividirse en dos grupos: las atribuibles a la ecuación de calor (es decir, a los diferentes métodos que se comparan en el presente trabajo) y los atribuibles a la generación interna (es decir, al método de integración particular para la reacción química; en este caso el de Runge-Kutta de cuarto orden en todos los casos). Las figuras 3.23 a 3.28 ponen de manifiesto que los diferentes métodos para resolver la ecuación de calor difieren en sus resultados cuando el número de nodos espaciales es pequeño y tienden a dar los mismos resultados al aumentar en número de nodos. Esto es una consecuencia de que todos los métodos convergen a la solución del mismo problema. Sin embargo, nótese que el EPAM no disminuye continuamente a medida que se aumenta el número de nodos, sino que tiende a un valor asintótico. En algunos casos, como el mostrado en las figuras 3.23 y 3.26, no sólo no disminuye el EPAM sino que aumenta hacia ese valor asintótico, en los tres métodos de elementos finitos. Este EPAM asintótico es muy aproximadamente igual al EPAM asociado con el caso adiabático con el mismo tamaño de incremento de tiempo $\Delta\tau$. Lo anterior es equivalente a decir que el EPAM obtenido al aumentar el número de nodos espaciales se reduce hasta llegar a ser únicamente el debido a la generación interna, es decir, al método de Runge-Kutta que se emplea para su integración.

Se ha encontrado entonces una diferencia importante entre el empleo de los diferentes métodos para resolver la ecuación de conducción de calor con y sin generación interna de calor debida a una reacción química. Cuando no existe generación interna de origen químico⁹, todos los métodos se acercan a la solución del problema a medida que aumenta el número de nodos espaciales y queda sólo un error remanente debido al tamaño del paso temporal, $\Delta\tau$.

⁹ Es decir, cuando la generación de calor es constante, independiente de la temperatura y la concentración, como en el caso que tiene solución analítica.

Como se ha mencionado, en el caso de diferencias finitas hacia adelante existe una restricción concreta para el valor de ΔZ , que depende de $\Delta \tau$ o viceversa. Sin embargo, los resultados de esta sección muestran que, cuando existe generación interna, el aumento en el número de nodos espaciales *no hace disminuir continuamente el error*, sino que lo hace tender al error asociado con la generación interna, que depende del tamaño del paso temporal $\Delta \tau$, y es independiente del error asociado con el tamaño del $\Delta \tau$ en la conducción de calor.

Es interesante también analizar la distribución espacio-temporal del error porcentual. Las figuras 3.29 a 3.31 muestran el error porcentual en función del tiempo para el caso $\Delta \Theta_w = 0.3$ y $Bi = 5$, en diferentes nodos espaciales. En el centro del molde ($Z = 0$) el comportamiento del error es muy semejante al del caso adiabático, porque la transferencia de calor tiene que darse a través de todo el espesor del molde. Por tanto, el efecto de las paredes es mínimo en $Z = 0$. La figura 3.29 muestra el error porcentual, $E\%$, evaluado en $Z = 0$, en función del tiempo con todos los métodos usando 6 divisiones espaciales y $\Delta \tau = 0.0025$, respecto del método de Crank-Nicolson con 12 divisiones espaciales y $\Delta \tau = 0.00125$. El “valle” que presentan todos los métodos corresponde al período de máxima generación de calor en ese nodo. En todos los métodos el error aumenta -su valor absoluto- a medida que aumenta la velocidad de generación, y dicho error es negativo, lo que significa que se obtiene un retraso en la conversión (integración) respecto de la solución del modelo. El método que produce un menor error es el de elementos finitos de Hermite y el que más se desvía es el de diferencias finitas hacia adelante. Todos los métodos tienen, cualitativamente, comportamientos semejantes en este nodo.

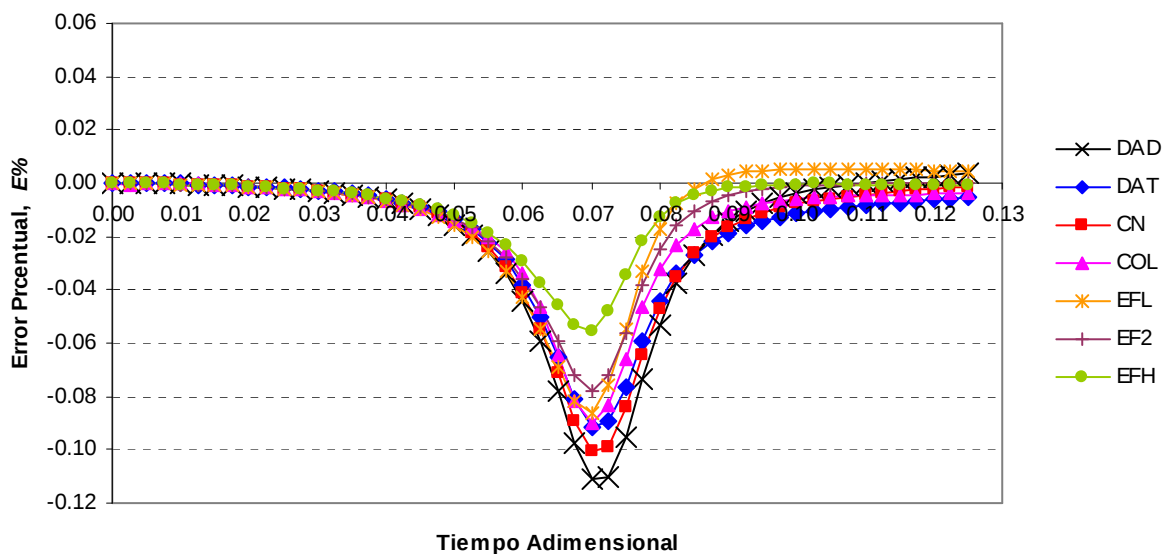


Figura 3.29. Error porcentual de la temperatura en el centro del molde, en función del tiempo, de los diversos métodos respecto del de Crank-Nicolson¹⁰

¹⁰ Las figuras 3.29 a 3.32 muestran los resultados del cálculo del error porcentual, $E\%$, para el caso estudiado en la presente sección. En los métodos comparados se usaron 6 nodos espaciales $\Delta \tau = 0.0025$ (NINCT = 50). El método de referencia fue Crank-Nicolson, con 12 nodos espaciales y $\Delta \tau = 0.00125$.

La figura 3.30 muestra el error porcentual calculado en $Z = 1$, que es la pared del molde, en las mismas condiciones de la gráfica anterior. Esta gráfica permite notar que, a diferencia del caso anterior, no todos los métodos producen resultados semejantes cualitativamente.

Es posible hacer dos grupos en cuanto a cómo reaccionan los métodos ante el incremento de temperatura debido a la pared caliente. Los métodos de diferencias finitas comienzan con un retraso, es decir, con un error negativo, para luego ir “recuperando” terreno y terminar en una situación de error positivo, influenciado claramente por la generación interna. En cambio, los métodos de colocación ortogonal y elementos finitos presentan un comportamiento casi exactamente opuesto respecto de los anteriores. Comienzan con una desviación positiva que cambia de signo a medida que se produce la generación de calor. En todos los métodos el error se estabiliza cuando cesa la generación interna.

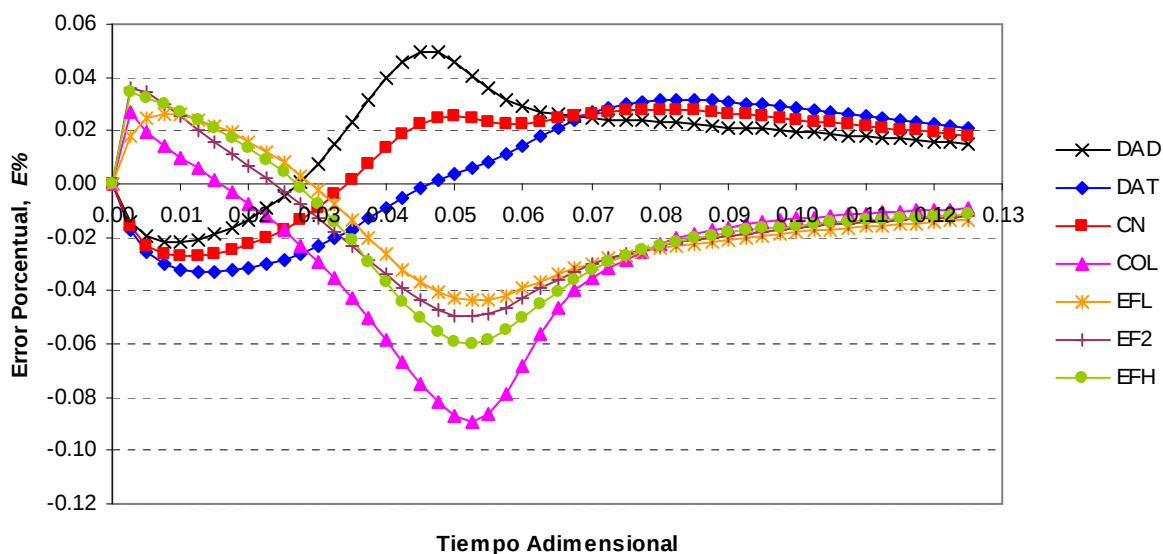


Figura 3.30. Error porcentual de la temperatura en la pared, en función del tiempo, de los diversos métodos respecto del de Crank-Nicolson

Por último, la figura 3.31 muestra el error porcentual promedio de los siete nodos espaciales, desde $Z = 0$ hasta $Z = 1$. Lo mostrado en esta gráfica es un comportamiento intermedio de los dos anteriores, más representativo de lo que sucede en el dominio temporal en función del tiempo. Los métodos de diferencias finitas comienzan con un error negativo que se acentúa con la generación interna. Al terminar la reacción, estos métodos tienden a generar un error positivo. Los demás métodos, en cambio, comienzan con un pequeño error positivo que se cambia a negativo pro efecto de la generación interna, para luego acercarse al nivel de error nulo al terminar la reacción.

Aunque las gráficas 3.29 a 3.31 no lo muestran, si el lapso de tiempo en que hace la comparación es suficientemente largo, todos los métodos tienden al nivel de error nulo, pero eso se debe a que a tiempo infinito ya no existe generación interna ni conducción de calor porque se alcanza el equilibrio térmico (es decir, se alcanza una temperatura constante en todo

el dominio espacial, que no cambia con el tiempo y es igual a la temperatura de las paredes). Evidentemente este caso no es de interés y por eso se realizó el presente estudio tomando en cuenta únicamente el lapso durante el cual se genera calor.

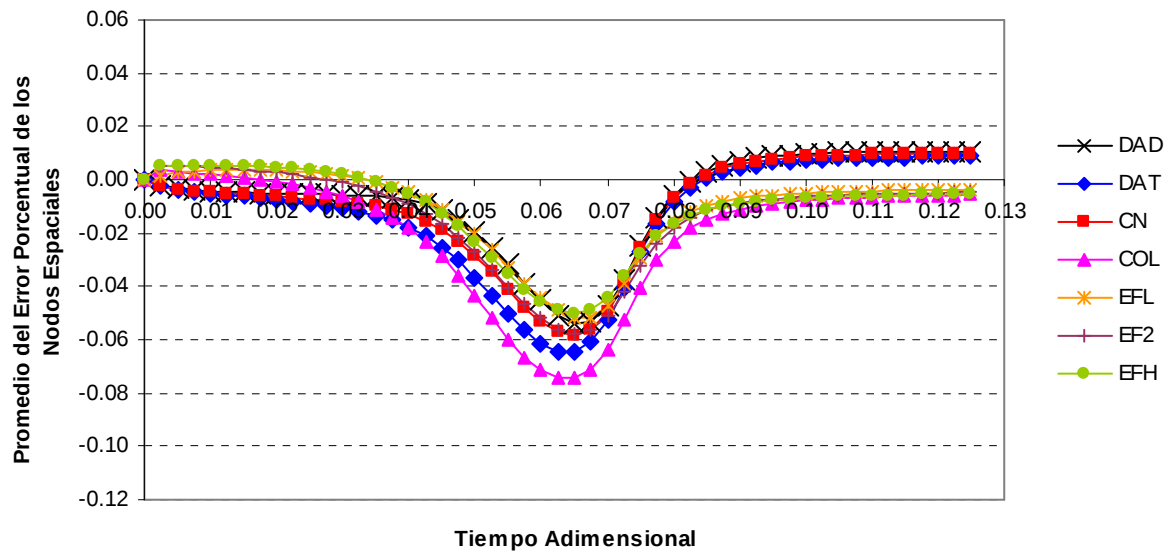


Figura 3.31. Error porcentual promedio de todos los nodos espaciales, de la temperatura, en función del tiempo, de los diversos métodos respecto de Crank-Nicolson

Las figuras 3.32 y 3.33 muestran la distribución espacio-temporal del error porcentual en temperatura, para dos métodos de comportamiento muy diferente: diferencias finitas hacia adelante (figura 3.32) y colocación ortogonal (figura 3.33). Nótese cómo en ambas gráficas existe una “zanja transversal” que corresponde a la zona de máximo error negativo y coincide bastante bien con la curva de generación interna de la figura 3.22.

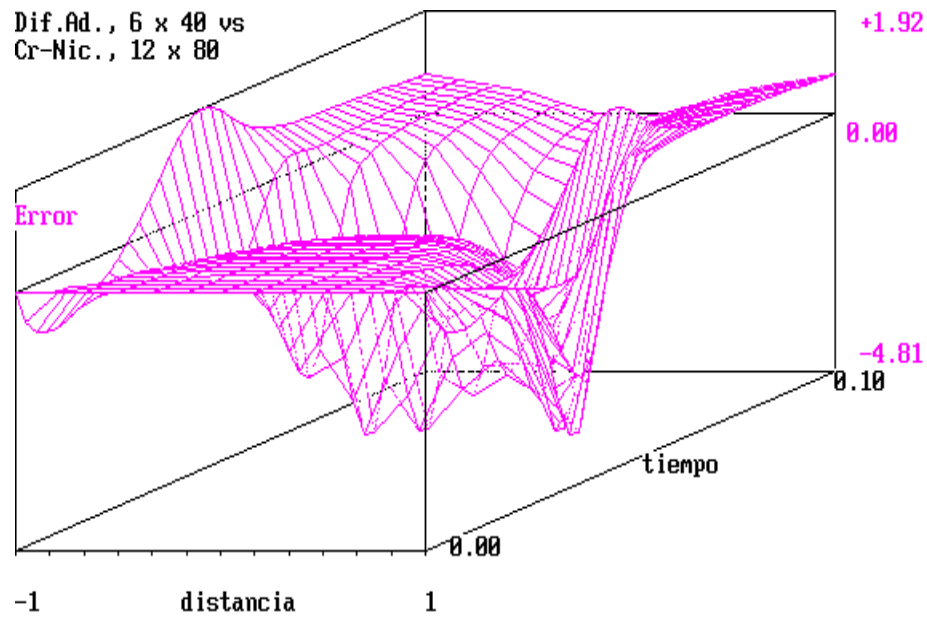


Figura 3.32. Error porcentual en temperatura, en función de la distancia y del tiempo, del método de diferencias finitas hacia adelante respecto del de Crank-Nicolson

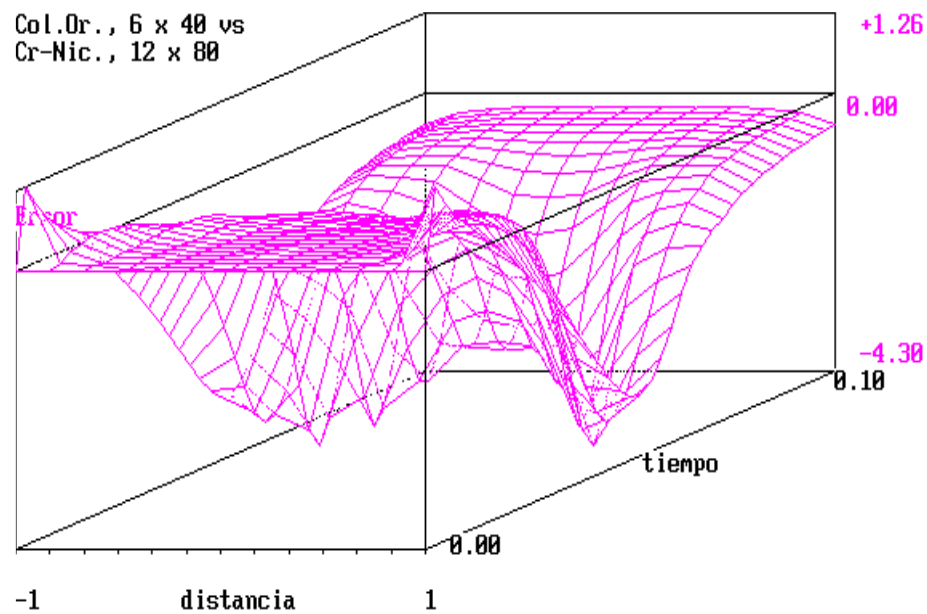


Figura 3.33. Error porcentual en temperatura, en función de la distancia y del tiempo, del método de colocación ortogonal respecto del de Crank-Nicolson

Nomenclatura del Capítulo III

b	exponente del $\Delta\tau$ en la ecuación (3.6), adimensional y sin significado físico
Bi	número de Biot = $U(H/2)/k$, adimensional (cfr. Capítulo I)
$Bi@0$	número de Biot crítico inicial: valor del Bi máximo para el cual la solución de la temperatura en la pared no muestra oscilaciones numéricas desde el primer incremento de tiempo, para un método numérico dado
$Bi@50$	número de Biot crítico a 50 iteraciones: valor del Bi máximo para el cual la solución de la temperatura en la pared no muestra oscilaciones numéricas al llegar al incremento de tiempo numero 50, para un método numérico dado
c	constante de proporcionalidad de la ecuación (3.6), adimensional y sin significado físico
E	error, diferencia de una propiedad calculada por dos métodos
EM	valor medio de E para un conjunto de nodos
$EPAM$	error porcentual absoluto medio
$E\%$	error porcentual
N	número de nodos en una comparación
$NINCT$	cantidad de incrementos de tiempo en una simulación
$NINCZ$	cantidad de nodos espaciales en una simulación
y	propiedad que se compara entre dos métodos

Letras griegas:

ΔT_{ad}	incremento de temperatura adiabático = $\Delta H_r C_0 / (\rho C_p)$, K (cfr. Capítulo I)
ΔZ	distancia adimensional entre dos nodos espaciales (constante) (cfr. Capítulo I)
$\Delta \Theta_w$	diferencia entre la temperatura adimensional del fluido exterior y la inicial de los reactivos.
$\Delta \tau$	incremento de tiempo adimensional (constante) (cfr. Capítulo I)
δ	= $\Delta \tau / (\Delta Z)^2$, cociente utilizado en diferencias finitas (cfr. Capítulo II)
Θ	temperatura adimensional = $T / \Delta T_{ad}$ (cfr. Capítulo I)
τ	tiempo adimensional = $(4\alpha / H^2)t$ (cfr. Capítulo I)

Subíndices:

a	propiedad del fluido exterior
i	nodo espacial
j	nodo temporal
p	propiedad evaluada en la pared del molde

Superíndices:

c	método que se quiere comparar
r	método de referencia

Conclusiones

Las conclusiones que se obtienen del presente trabajo están contenidas a lo largo del texto del Capítulo III. Se resumen en lo siguiente:

La ecuación de conducción de calor unidimensional con generación de calor interna por reacción química, considerando un extremo adiabático (o simetría respecto del dominio espacial) y transferencia de calor con convección forzada en el otro extremo del dominio (la pared del recipiente) puede ser resuelta, con ciertas limitaciones, por cualquiera de los métodos de diferencias finitas, colocación ortogonal y elementos finitos. Estas limitaciones se resumen a continuación:

1. Generación Interna

- 1.1 La principal causa de divergencia al resolver el modelo es debida a la generación interna de calor, especialmente si la reacción es violenta y los pasos en tiempo son relativamente grandes.
- 1.2 La generación interna es también la principal causa de error en cualquier método, especialmente cuando la reacción es violenta.
- 1.3 La generación interna es determinante en las conclusiones expresadas más adelante acerca del mayor beneficio de disminuir el tamaño del paso temporal en vez de disminuir el tamaño de las divisiones espaciales, así como del nivel de error obtenido (ver 4.2, 5.3, 5.4 y 5.5).

2. Número de Biot Crítico

- 2.1 Para los métodos de diferencias finitas hacia adelante, el de Crank-Nicolson y todos los de elementos finitos, existe un número de Biot crítico, Bi_c , tal que si el Bi del problema a resolver es $Bi > Bi_c$, se tendrá oscilación en la temperatura calculada en la pared del molde (esta oscilación no tiene significado físico).
- 2.2 Los métodos de diferencias finitas hacia atrás y colocación ortogonal nunca presentan oscilaciones en la temperatura de la pared.
- 2.3 Número de Biot crítico en función de:
 - 2.3.1 Para cada uno de los métodos mencionados en el 2.1, la magnitud del número de Biot crítico no depende substancialmente de la diferencia de temperatura que exista entre el sistema reactivo y las paredes del recipiente ($\Delta\Theta_w$), suponiendo esta diferencia de una magnitud razonable con significado físico.

- 2.3.2 Una excepción al punto anterior aparece en el método de Crank-Nicolson. En este método, sólo cuando $\Delta\Theta_w = 0$ no se produce oscilación alguna, mientras que si $\Delta\Theta_w \neq 0$ existe algún número de Biot crítico de acuerdo con lo expresado en el punto anterior.
- 2.4 Número de Biot crítico en función del tamaño de las divisiones espaciales:
 - 2.4.1 En todos los métodos mencionados en el apartado 2.1 el número de Biot crítico aumenta con el tamaño de las divisiones espaciales.
 - 2.4.2 En el método de diferencias finitas hacia adelante, el de Crank-Nicolson y el de elementos finitos lineales, este aumento es lineal respecto del tamaño de las divisiones espaciales.
- 2.5 Número de Biot crítico en función del tamaño de paso temporal.
 - 2.5.1 En todos los métodos mencionados en el apartado 2.1, excepto en elementos finitos de Hermite, el número de Biot crítico es inversamente proporcional al tamaño de paso temporal elevado a una potencia positiva, independientemente del tamaño de paso temporal.
 - 2.5.2 En diferencias finitas hacia adelante, Crank-Nicolson y elementos finitos lineales, dicha potencia es, además, independiente del tamaño de las divisiones espaciales.
 - 2.5.3 En diferencias finitas hacia adelante dicha potencia es 1. Es decir, el número de Biot crítico es inversamente proporcional al tamaño de las divisiones espaciales.
- 2.6 Pared isotérmica:
 - 2.6.1 De lo anterior se deduce la imposibilidad de simular una pared del molde isotérmica mediante el uso del número de Biot muy grande, utilizando los métodos que oscilan, mencionados en el apartado 2.1.
 - 2.6.2 En el caso general ($\Delta\Theta_w \geq 0$), sólo es posible simular la pared en forma isotérmica utilizando un número de Biot muy grande, mediante los métodos de diferencias finitas hacia atrás y colocación ortogonal.
 - 2.6.3 Si la temperatura inicial del sistema reactivo es igual al de las paredes ($\Delta\Theta_w = 0$; activación por mezclado) también es posible modelar la pared isotérmica mediante el uso de un número de Biot muy grande utilizando el método de Crank-Nicolson y, excepcionalmente, con elementos finitos de Hermite.

3. Comparación con la Solución Analítica

- 3.1 El método que más se acerca a la solución del caso analítico es el de elementos finitos de Hermite, en el caso de que no oscile (limitado por el tamaño de la separación entre nodos espaciales).
- 3.2 El método de colocación ortogonal se acerca mucho a la solución analítica si se tienen entre dos y cuatro puntos de colocación interiores.
- 3.3 El método de Crank-Nicolson es el que más se acerca a la solución analítica a medida que aumenta el número de nodos espaciales.

- 3.4 Si se tienen varios nodos espaciales, el error respecto de la solución analítica disminuye más con la disminución del paso temporal que con el incremento en el número de nodos espaciales.

4. Comparación del Caso con Pared Isotérmica

Por lo expresado en el apartado 3.3 y dado que no existe solución analítica para este caso, se tomó como referencia el método de Crank-Nicolson con 12 divisiones espaciales.

- 4.1 Todos los métodos capaces de resolver el caso con pared isotérmica producen resultados semejantes (ver 2.6.2 y 2.6.3).
- 4.2 El beneficio de reducir el tamaño del paso temporal es mucho mayor que de aumentar el número de nodos espaciales, tanto desde el punto de vista del error obtenido como del trabajo de cómputo requerido.

5. Comparación de un “Caso Real”

- 5.1 Si el número de divisiones espaciales es pequeño, el EPAM disminuye rápidamente con el aumento en el número de divisiones espaciales.
- 5.2 El EPAM tiende a un valor asintótico, mayor que cero, al aumentar el número de divisiones espaciales.
- 5.3 El valor asintótico referido en el apartado anterior es aproximadamente el EPAM que se obtendría en el caso adiabático, es decir, es el ocasionado por la integración del término de generación de calor interna.
- 5.4 Al igual que en casos anteriores, el beneficio de reducir el tamaño del paso temporal es mayor que el de aumentar el número de divisiones espaciales.
- 5.5 El error porcentual máximo, en todos los métodos, se genera durante el período de máxima generación de calor interna.

6. Otras Observaciones

6.1 Trabajo de programación:

- Menor: método de diferencias finitas hacia adelante, debido a que es explícito y no requiere la solución de matrices.
- Mayor: colocación ortogonal, por la generación de las matrices y la posible necesidad de interpolar resultados.

6.2 Error producido en general:

- Menor: elementos finitos de Hermite.
- Mayor: diferencias finitas hacia adelante.

6.3 Rapidez de ejecución:

- Menor: elementos finitos de Hermite.
- Mayor: diferencias finitas hacia adelante.

6.4 Estabilidad respecto de perturbaciones en la frontera:

- Menor: elementos finitos de segundo grado.
- Mayor: diferencias finitas hacia atrás y colocación ortogonal.

Referencias

- Ames, William F. *Numerical Methods for Partial Differential Equations*. Academic Press, 1977. pp. 322-323.
- Broyer, Ephraim and Macosko, Christopher. *Curing and Heat Transfer in Polyurethane Reaction Molding*. Polym.Eng.Sci., 18, 5, (1978).
- Carnahan, B., Luthe, H.A. and Wilkes, J.O. *Applied Numerical Methods*. John Wiley & Sons, Inc. (1969). p. 433.
- Carslaw, H.S. and Jaeger, J.C. *Conduction of Heat in Solids*. Oxford University Press, (1959). p. 131.
- Castro, J.M., González, V.M. and Macosko, C.W. *Process Behavior Differences Between Thermally and Mixing Activated RIM Type Chemical Systems*. Soc.Plust.Eng.Tech.Papers, 27, 363 (1981).
- Castro, J.M. and Macosko, C.W. *Studies of Mold Filling and Curing in the Reaction Injection Molding Process*. AIChE J, 28, 2, 250, (1982).
- Domine, Joseph D. and Gogos, Costas G. *Computer Simulation of Injection Molding of a Reacting Linear Condensation Polymer*. Society of Plastics Engineers, 1976 ANTEC, 1976, Atlantic City, New Jersey.
- Ferguson, Noble B., and Finlayson, Bruce A. *Transient Chemical Reaction Analysis by Orthogonal Collocation*. Chem. Eng. J., 1, 327-335, (1970).
- Finlayson, Bruce A. *Nonlinear Analysis in Chemical Engineering*. McGraw-Hill, 1980.
- Finlayson, Bruce A. *Orthogonal Collocation in Chemical Reaction Engineering*. Cat.Rev.Sci.Eng., 10(1), 69-138 (1974).
- González-Romero, Víctor M. and Macosko, Christopher W. *Adiabatic Filling Through Packed Beds in Composite Reaction Injection Holding*. Polymer Process Eng., 3 (1&2), 173-184, (1985).
- Haberland, Christoph and Lahrmann, Andreas. *A Comparative Investigation on Recurrence Formulae in Finite Difference Methods*. Int.J.Num.Method.Eng., 25, 593-609 (1988).
- Hermosillo, Juan Jorge y González-Romero, Víctor M. *Métodos Numéricos para la Simulación de una Reacción de Curado*. Congreso de Matemáticas Aplicadas en Ingeniería Química, UAM, 1989, II.

Hermosillo, Juan Jorge y González-Romero, Víctor M. *Simulación de una Polimerización Estática: Comparación de Varios Métodos Numéricos*. Avances en Ingeniería Química 1989. Academia Mexicana de Investigación y Docencia en Ingeniería Química, 1989, I.

Hernández Vargas, María Esther. *Simulación Numérica de una Polimerización Estática*. Tesis de licenciatura en Ingeniería Química. Facultad de Ciencias Químicas, Universidad de Guadalajara, 1985.

Kreyszig, Erwin. *Matemáticas Avanzadas para Ingeniería*. Ed. Limusa, México, 1977. p. 159.

Lee, Ly James and Macosko, Christopher W. *Heat Transfer in Polymer Reaction Molding*. Int. J. Heat Mass Transfer, 23, 1479-1492, (1980).

Lekakou, C.N. and Richardson, S.M. *Simulation of Reacting Flow During Filling in Reaction Injection Molding (RIM)*. Polym.Eng.Sci., 26, 18, (1986).

Macosko, Christopher W. *Fundamentals of Reaction Injection Molding*. Society of Plastics Engineers, Hanser Publishers, (1989). p. 144.

Marciano, Jorge H., Rojas, Alfredo J. and Williams, Roberto J.J. *Curing Kinetics of a Rigid Polyurethane Foam Formulation*. (1980).

Strang, Gilbert and Fix, George J. *An Analysis of the Finite Element Method*. Prentice-Hall, (1978), p.78.

Villadsen, John and Michelsen, Michael L. *Solution of Differential Equation Models by Polynomial Approximation*. Prentice-Hall, (1978), p.78.

Villadsen, J.V. and Stewart, W.E. *Solution of Boundary-Value Problems by Orthogonal Collocation*. Chem.Eng.Sci., 22, pp. 1483-1501, (1967).

Welty, James R., Wicks, Charles E. y Wilson, Robert E. *Fundamentos de Transferencia de Momento, Calor y Masa*. Ed. Limusa, México, (1984) p. 293.

Anexo I

Tablas Numéricas para Colocación Ortogonal

Polinomios de Jacobi

La tabla A.1.1 contiene los coeficientes de los polinomios que se utilizaron, de acuerdo con la forma siguiente:

$$P_i(Z^2) = (1 - Z^2)(1 - bZ^2 + cZ^4 - dZ^6 + \dots) \quad (2.59)$$

Tabla A.1.1. Coeficientes de los polinomios de Jacobi, multiplicados por el factor $(1-Z^2)$, utilizados en el método de colocación ortogonal (valores redondeados a números enteros)									
$N+1$	b	c	d	e	f	g	h	i	J
2	5	0	0	0	0	0	0	0	0
3	14	21	0	0	0	0	0	0	0
4	27	99	86	0	0	0	0	0	0
5	44	286	572	347	0	0	0	0	0
6	65	650	2210	2999	1400	0	0	0	0
7	90	1275	6460	14535	14858	5628	0	0	0
8	119	2261	15827	52003	86672	70913	22599	0	0
9	152	3724	34261	152950	367080	483878	329675	90661	0
10	189	5796	67620	391230	1260630	2368456	2576672	1503059	363485

Las raíces de estos polinomios se encontraron mediante el paquete de software MathCad 1.0 y están reportadas en la tabla A.1.2.

Tabla A.1.2. Raíces de los polinomios de Jacobi de grado i multiplicados por el factor $(1-Z^2)$, de acuerdo con la ecuación (2.59), usando los coeficientes de la tabla A.1.1.					
i	Z_1	Z_2	Z_3	Z_4	Z_5
1	0.44721360	1.00000000	-	-	-
2	0.28523152	0.76505532	1.00000000	-	-
3	0.20929922	0.59170018	0.87184015	1.00000000	-
4	0.16527896	0.47792495	0.73877386	0.91953391	1.00000000
5	0.13655293	0.39953094	0.63287615	0.81927932	0.94489927
6	0.11633187	0.34272401	0.55063940	0.72886860	0.86780106
7	0.10132627	0.29983047	0.48605942	0.65238872	0.79200824
8	0.08974909	0.26636265	0.43441504	0.58850484	0.72367931
9	0.08054594	0.23955171	0.39235318	0.53499286	0.66377647

Tabla A.1.2, continuación. Raíces de los polinomios de Jacobi de grado i multiplicados por el factor $(1-Z^2)$, de acuerdo con la ecuación (2.59), usando los coeficientes de la tabla A.1.1.

i	Z_6	Z_7	Z_8	Z_9	Z_{10}
5	1.00000000	-	-	-	-
6	0.95993504	1.00000000	-	-	-
7	0.89920062	0.96956801	1.00000000	-	-
8	0.83559360	0.92064909	0.97610560	1.00000000	-
9	0.77536792	0.86687883	0.93593345	0.98074417	1.00000000

Anexo II

Programa para Generación de las Matrices para Colocación Ortogonal

El siguiente programa fue escrito para correr en Turbo Basic®.

```
'          GENERACION DE MATRICES PARA COLOCACION ORTOGONAL
'
'          Copyright 1988 by:
'
'          Juan Jorge Hermosillo Villalobos

SCREEN 0: CLS:?:?:?"          GENERACION DE MATRICES PARA COLOCACION
ORTOGONAL

?:?:?"Introducción:
?:?
?"Este programa genera las matrices A y B para colocación ortogonal con
?"polinomios simétricos respecto de  $x = 0$ . Los datos de entrada son las
?"raíces del polinomio."
?:?

?"      1) Resultados en el monitor.
?"      2) Resultados en impresora.
?"      3) Terminar el programa.
SALIDA$ = INPUT$(1)

IF VAL(SALIDA$) < 1 OR VAL(SALIDA$) > 2 THEN END

?:?
INPUT"¿Cuántas raíces tiene el polinomio? ",N
?:?"Enseguida, alimente las raíces del polinomio, de menor a mayor."
?

DEFDBL A, C, D, X, M
DIM A(N+1,N+1), AUM(N+1,N+1), AINV(N,N), C(N,N), D(N,N), MATA(N,N),
MATB(N,N), X(N)

'Se alimenta la matriz cuadrada:
FOR I = 1 TO N
    AUM(I,I) = 1
    ?"Raíz "I" = ";: INPUT X(I)
    FOR J = 1 TO N
        A(I,J) = X(I)^(2*J-2)
        C(I,J) = (2*J-2)*X(I)^(2*J-3)
        D(I,J) = (2*J-3)*(2*J-2)*X(I)^(2*J-4)
    NEXT J
NEXT I
```

```

?"      Elementos de la matriz Q:"
      FOR I = 1 TO N: FOR J = 1 TO N: ?"Q("I","J") ="A(I,J): NEXT: NEXT: Z$
= INPUT$(1)

?"      Elementos de la matriz C:"
      FOR I = 1 TO N: FOR J = 1 TO N: ?"C("I","J") ="C(I,J): NEXT: NEXT: Z$
= INPUT$(1)

?"      Elementos de la matriz D:"
      FOR I = 1 TO N: FOR J = 1 TO N: ?"D("I","J") ="D(I,J): NEXT: NEXT: Z$
= INPUT$(1)

'Comienza eliminación gaussiana. Q es el número de iteración
  FOR Q = 1 TO N-1
    'Se ejecuta pivoteo parcial en cada iteración Q.
    MAX = ABS (A(Q,Q)): R=Q
    FOR I = Q TO N
      IF ABS(A(I,Q)) > MAX THEN MAX = ABS(A(I,Q)): R=I
    NEXT I
    IF R <> Q THEN
      FOR J = 1 TO N
        AA = A(Q,J):          AB = AUM(Q,J)
        A(Q,J) = A(R,J):      AUM(Q,J) = AUM(R,J)
        A(R,J) = AA:          AUM(R,J) = AB
      NEXT J
    END IF
    'Termina pivoteo parcial.

    FOR I = Q+1 TO N
      AFACT = A(I,Q)/A(Q,Q)
      FOR J = 1 TO N
        A(I,J) = A(I,J) - AFACT*A(Q,J)
        AUM(I,J) = AUM(I,J) - AFACT*AUM(Q,J)
      NEXT J
    NEXT I
  NEXT Q
  'Termina la eliminación gaussiana.

  'Comienza substitución hacia atrás con X = matriz identidad.
  IF A(N,N) = 0 THEN ?:"La matriz Q no tiene inversa."
  FOR J = 1 TO N
    AINV(N,J) = AUM(N,J)/A(N,N)
    FOR I = N-1 TO 1 STEP -1
      CS = 0
      FOR K = I+1 TO N
        CS = CS + A(I,K) * AINV(K,J)
      NEXT K
      AINV(I,J) = (AUM(I,J)-CS)/A(I,I)
    NEXT I
  NEXT J

IF SALIDA$ = "1" THEN
  CLS:
  PRINT"Elementos de la matriz Q inversa:"
  FOR I = 1 TO N: FOR J = 1 TO N: PRINT"QINV("I","J") ="AINV(I,J): NEXT:
NEXT
  Z$ = INPUT$(1)
ELSE

```

```

    LPRINT:LPRINT"Elementos de la matriz Q inversa:"
    FOR I = 1 TO N: FOR J = 1 TO N: LPRINT"QINV("I","J") ="AINV(I,J): NEXT:
NEXT
END IF

'Generación de las matrices para colocación ortogonal.
'La matriz A (MATA) es para aproximar la primera derivada.
'La matriz B (MATB) es para aproximar la segunda derivada.

    FOR I = 1 TO N
        FOR J = 1 TO N
            CS = 0: DS = 0
            FOR K = 1 TO N
                CS = CS + C(I,K)*AINV(K,J)
                DS = DS + D(I,K)*AINV(K,J)
            NEXT K
            MATA(I,J) = CS
            MATB(I,J) = DS
        NEXT J
    NEXT I

IF SALIDA$ = "1" THEN
    CLS:?
    PRINT"Elementos de la matriz A para colocación ortogonal:"
    FOR I = 1 TO N: FOR J = 1 TO N: PRINT"A("I","J") =" MATA(I,J): NEXT: NEXT
    Z$=INPUT$(1)
    CLS:?
    PRINT"Elementos de la matriz B para colocación ortogonal:"
    FOR I = 1 TO N: FOR J = 1 TO N: PRINT"B("I","J") =" MATB(I,J): NEXT: NEXT
ELSE
    LPRINT:LPRINT"Elementos de la matriz A para colocación ortogonal:"
    FOR I = 1 TO N: FOR J = 1 TO N: LPRINT"A("I","J") =" MATA(I,J): NEXT:
NEXT
    LPRINT:LPRINT"Elementos de la matriz B para colocación ortogonal:"
    FOR I = 1 TO N: FOR J = 1 TO N: LPRINT"B("I","J") =" MATB(I,J): NEXT:
NEXT
END IF

END

```

Anexo III

Programa para Simular Polimerizaciones Estáticas y Comparar los Métodos Numéricos

El programa que se presenta en este anexo, denominado POLICOMP.BAS, fue escrito para correr en Turbo Basic[®] versión 1.1 de Borland International Inc. Para funcionar adecuadamente¹¹ requiere también los programas que se encuentran en el Anexo IV. En conjunto, el programa principal junto con los tres complementarios contienen alrededor de 1850 líneas de código, sin incluir el programa requerido para la generación de las matrices para colocación ortogonal.

Con este programa se realizaron las gráficas tridimensionales de los Capítulos I y III, de temperatura, conversión, velocidad de reacción y error, y tiene capacidad para generar muchas más según lo que se quiera mostrar o estudiar. Asimismo, con el uso de los módulos adecuados que están integrados en el programa, se llevaron a cabo las comparaciones entre los diversos métodos numéricos.

El programa está estructurado en bloques (separados en el listado por líneas “XXXXXXXXXXXXXXXXX...”) de la siguiente forma: la primera parte consiste en definir las propiedades físicas y químicas del sistema reactivo que se quiere modelar, junto con las condiciones iniciales y de frontera. En el programa se encuentra definido un caso particular, con sentido físico, que es el que se empleó para muchos de los ejemplos del Capítulo I (excepto por el número de Biot, que puede variarse para simular casos reales o hipotéticos).

La segunda parte contiene la formulación de las matrices de los diversos métodos numéricos, de acuerdo con lo expuesto en el Capítulo II. Algunos de los métodos requieren adaptaciones para poder realizar las comparaciones entre sí. Por ejemplo, el método de colocación ortogonal proporciona los resultados sobre los nodos de colocación, sólo en el caso en que no se vaya a comparar con otros métodos. Cuando se está en el “modo de comparación” –lo cual se pide al usuario al principio del programa– se realiza una interpolación para obtener los resultados en nodos equidistantes y, por ello, comparables con los demás métodos. En el caso del método de elementos finitos con polinomios de segundo grado, los resultados mostrados incluyen el nodo interno que se genera dentro de cada elemento finito. Sin embargo, la comparación se efectúa solamente entre los nodos “externos” de cada elemento.

La tercera parte contiene la subrutina para comparación de dos métodos cuyos resultados se hayan almacenado previamente en la memoria. En esta subrutina primero se comparan *las*

¹¹ Advertencia: el programa que se presenta en este anexo funcionó satisfactoriamente para la realización del presente estudio y su elaboración consumió propiamente la mayor parte del tiempo dedicado al trabajo. Incluso a finales de 2003, el programa funcionaba adecuadamente bajo Windows[®] 98 y XP, en procesadores Pentium III de diversas velocidades. Sin embargo, el programa no comprende más que un trabajo muy elemental de validación contra errores posibles por parte del usuario. Si se le alimentan valores al azar, lejanos a un sentido físico y factible, es probable que el programa no funcione adecuadamente por encontrar parámetros de dimensiones improcesables, además de las razones estudiadas y reportadas en la presente tesis.

coordenadas espacial y temporal de todos los resultados obtenidos por un método, con los obtenidos por el otro método. Cuando ambas coordenadas coinciden, se efectúa la comparación de la variable dependiente –temperatura, conversión, etc., – en forma absoluta o porcentual. También pueden calcularse parámetros estadísticos generales, como el error medio, la media del valor absoluto del error porcentual, el error medio de los nodos espaciales en función del tiempo, los errores máximos positivo y negativo y en qué nodo ocurren, etc.

Existen además otras subrutinas, dentro del programa principal, como la de determinación de máximos y mínimos, la salida de información a cada iteración, etc. que cumplen funciones complementarias.

Como programas aparte, *que deben compilarse junto con el principal*¹², están escritas también las subrutinas de eliminación gaussiana, GAUSS.BAS y de Runge-Kutta de cuarto orden, RKUTTA.POL, que se emplean intensivamente en todos los métodos. Estas dos subrutinas se encuentran en el Anexo IV.

Por último, la subrutina SALIDATA.POL, incluida en el Anexo IV, que también debe compilarse junto con el principal, permite la tabulación de todos los resultados calculados, es decir, la temperatura, la conversión y la velocidad de generación de calor obtenidos por un método dado, así como el error calculado entre dos métodos. Esta subrutina permite también mostrar los resultados en forma gráfica en una variedad de formas en dos y tres dimensiones:

- Resultados numéricos:
 - Temperatura, conversión y velocidad de reacción (o generación de calor) en función del tiempo en todos los nodos.
 - Datos comparativos de los resultados obtenidos por dos métodos.
- Resultados gráficos:
 - En dos dimensiones:
 - Distribución espacial de la temperatura, a tiempos dados, o representada dinámicamente en función del tiempo (a la velocidad que se especifique).
 - Distribución espacial de la conversión química, a tiempos dados, o representada dinámicamente en función del tiempo (idem).
 - Evolución temporal de la temperatura en los diversos nodos espaciales.
 - Evolución temporal de la conversión en los diversos nodos espaciales.
 - Si se hacen corridas del mismo caso con dos diferentes métodos y se ejecuta la función de comparación, el programa permite también graficar el error relativo entre un método y otro, con una distribución espacio-temporal. El tipo de error que se muestra es el que se haya indicado previamente: absoluto o porcentual.
 - En tres dimensiones:
 - Temperatura en función de la distancia y el tiempo, con la opción de mostrar bandas de colores indicativas de igual temperatura.
 - Conversión en función de la distancia y el tiempo, con la opción de mostrar bandas de colores indicativas de igual conversión.

¹² Las subrutinas deben estar presentes en el mismo directorio que el programa principal en el momento de la compilación.

- Velocidad de reacción (o rapidez de generación de calor) en función de la distancia y el tiempo, con opción de mostrar bandas de colores indicativas de igual velocidad.
- Si se hacen corridas del mismo caso con dos diferentes métodos y se ejecuta la función de comparación, el programa permite también graficar el error relativo entre un método y otro, con una distribución espacio-temporal. El tipo de error que se muestra es el que se haya indicado previamente: absoluto o porcentual.
- Existe la opción de hacer una presentación tridimensional con anaglifos bicolores, que requieren unos anteojos especiales (rojo y azul) para ver el efecto en pantalla.

Aunque el programa carece de una función de ayuda, muchos de los menús que aparecen contienen una explicación breve de lo que debe hacerse, así como valores sugeridos para muchos de los parámetros que deben suministrarse. Por esto, un usuario con nociones de lo que sucede en el programa no debe de tener dificultad en su utilización.

Enseguida se presenta el código del programa utilizado en el presente trabajo¹³:

```
'
                                SIMULADOR DE POLIMERIZACIONES ESTATICAS

'
                                Copyright 1989 by:
'
                                Juan Jorge Hermosillo Villalobos

'
                                Facultad de Ciencias Químicas
                                Universidad de Guadalajara

'
                                Asesor: Dr. Víctor Manuel González Romero

'XXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXX

DEFDBL D

SCREEN 2: SCREEN 0: CLS
?:?:?:?
?"                                SIMULADOR DE POLIMERIZACIONES ESTATICAS
?
?"Este programa simula una polimerización estática (reacción de curado) en un"_
"recipiente de longitud y anchura infinitas y espesor finito. Esto equivale a"_
"resolver la ecuación de calor con generación interna en forma unidimensional."
?
?"En este programa existen ocho métodos numéricos disponibles para hacer la"_
"simulación de la conducción de calor. La generación interna se resuelve en"_
"todos los casos por el método de Runge-Kutta de cuarto orden con"_
"extrapolación de Richardson.
```

¹³ La conversión del código original al procesador de texto produjo algunos caracteres anómalos en los diálogos y comentarios (las letras acentuadas y algunos signos de puntuación), que fueron corregidos para la presente edición escrita. Se puede suponer que el resto del código se convirtió adecuadamente.

```

?:?"      a) Correr el programa.
?:?"      c) Comparar resultados usando los mismos valores.
?:?"      s) Salir del programa.
?
?"Escoja alguna alternativa (a/c/s)
Z$ = INPUT$(1)
SELECT CASE Z$
  CASE "c","C": COMPARA = 1
  CASE "s","S": END
  CASE ELSE: COMPARA = 0
END SELECT

IF COMPARA = 1 THEN
' Dimensionamiento para almacenar los resultados:
  DIM THETA(15,201), CONV(15,201), DTAX(15,201), Z(15), TAU(201), THETA1(15)
' Dimensionamiento para almacenar los resultados de referencia:
  DIM THETAREF(15,201), CONVREF(15,201), DTAXREF(15,201), ZREF(15), TAUREF(201)
  DIM ERROR1(15,201), ERRMED(201)
ELSE
  DIM THETA(15,201), CONV(15,201), DTAX(15,201), Z(15), TAU(201), THETA1(15)
END IF

' Dimensionamiento para la subrutina de eliminación gaussiana:
  DIM DA(15,16),DB(15),DX(15)
' Matrices y coeficientes para colocación:
  DIM DQINV(10,10),DT(10),DC(10),DD(10)
' Dimensionamiento para las gr ficas:
  DIM XG(15),XG2(15),XGI(15),XG2I(15),Y1(15),Y2(15),Y3(15),Y4(15)
' Dimensionamiento para colores de isobandas:
  DIM COL(16):DIM COL$(16)

'Definición de algunos valores necesarios o sugeridos:

  NINCZ = 5: NINCT = 25: NPCI = 4
  XFACT = 192: YFACT = 91
  COLFOND = 0: COLFIG = 7: COLFIG1 = 12:
  COLFIG2 = 10: COLFIG3 = 9: COLFIG4 = 14
  COL(1)=8: COL(2)=7:COL(3)=4: COL(4)=12:COL(5)=6: COL(6)=14:COL(7)=2
  COL(8)=10:COL(9)=3:COL(10)=11:COL(11)=1:COL(12)=9:COL(13)=5:COL(14)=13
  ACUMULADA$ = "s": GRAFPARED$ = "n": ESTEREO$ = "n"

'Definición de propiedades y condiciones físicas y químicas:

  KT = 0.0006      'Conductividad térmica (cal/s K cm)
  HR = 23000      'Entalpía de reacción (cal/mol)
  CP = .41         'Capacidad calorífica (cal/g K)
  DE = 1           'Densidad (g/cc)
  EA = 12000      'Energía de activación (cal/mol)
  FP = 2.56E+09   'Factor preexponencial (1/s)
  ORD = 2         'Orden de la reacción (adimensional)

  TI = 303        'Temperatura inicial del reactivo (K)
  TW = 347        'Temperatura del fluido exterior (K)
  CI = 0.0026     'Concentración inicial del reactivo (g/cc)
  BIOT = 0        'Número de Biot para caso adiabático
  ESP = 1         'Espesor del molde (cm)

'XXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXX

800 CLS:?:?:?:?
?
?:?:?"      ALIMENTACION DE LAS PROPIEDADES TERMICAS DEL SISTEMA
?:?:?"      a) Alimentar los valores de las propiedades térmicas.
?:?:?"      b) Usar los valores ya definidos en el programa.
?:?:?"      s) Terminar el programa.
?:?:?"      Escoja alguna alternativa (a/b/s): ": Z$ = INPUT$(1)

```

```

SELECT CASE Z$
  CASE "a", "A": GOTO 1000
  CASE "s", "S": END
  CASE ELSE: GOTO 1500
END SELECT

1000 CLS:PRINT:PRINT
?"          PROPIEDADES TERMICAS DEL SISTEMA REACTIVO
?:?
?"Alimente los valores que desee cambiar. Los valores que aparecen son los_"
  "definidos en el programa. Para utilizar estos valores, sólo presione la tecla_"
  "RETURN. Al alimentar nuevos valores, tenga cuidado con las unidades."
?:?
?"      ¿Desea correr un caso semejante al analítico? (s/n)";: CASORARO$ = INPUT$(1)
  IF CASORARO$ = "S" OR CASORARO$ = "s" THEN CASORARO = 1 ELSE CASORARO = 0
  IF CASORARO = 1 THEN ORD=0: EA=0: FP=0.00006

?"      Conductividad t,rmica (cal/s K cm) = ";: ? USING "###.### ";KT;
  INPUT KT$: IF KT$ <> "" THEN KT = VAL(KT$)
?"      Entalpía de reacciøn (cal/mol) = ";: ? USING "###.### ";HR;
  INPUT HR$: IF HR$ <> "" THEN HR = VAL(HR$)
?"      Capacidad calorífica (cal/g K) = ";: ? USING "###.### ";CP;
  INPUT CP$: IF CP$ <> "" THEN CP = VAL(CP$)
?"      Densidad (g/cc) = ";: ? USING "###.### ";DE ;
  INPUT DE$: IF DE$ <> "" THEN DE = VAL(DE$)
?"      Energía de activación (cal/mol) = ";: ? USING "###.### ";EA;
  INPUT EA$: IF EA$ <> "" THEN EA = VAL(EA$)
?"      Factor preexponencial (1/s) = ";: ? USING "###.### ";FP;
  INPUT FP$: IF FP$ <> "" THEN FP = VAL(FP$)
?"      Orden de la reacción (adimensional) = ";: ? USING "###.### ";ORD ;
  INPUT ORD$: IF ORD$ <> "" THEN ORD = VAL(ORD$)

?:?"      ¿Todos los valores están correctos? (s/n)";: Z$ = INPUT$(1)
  IF Z$ = "n" OR Z$ = "N" THEN 1000

1500 CLS:PRINT:PRINT
?"          CONDICIONES INICIALES Y DE FRONTERA
?:?
?"Alimente los valores que desee cambiar. Entre paréntesis aparecen los valores_"
  "que tomará el programa si no se alimentan otros. Para utilizar estos valores,"_
  "sólo presione la tecla RETURN."
?:?
?"      Temperatura inicial del sistema (K) = ";: ? USING "###.### ";TI;
  INPUT TI$: IF TI$ <> "" THEN TI = VAL(TI$)
  IF CASORARO = 1 THEN TW = TI
?"      Temperatura del fluido exterior (K) = ";: ? USING "###.### ";TW;
  INPUT TW$: IF TW$ <> "" THEN TW = VAL(TW$)
?"      Concentración inicial de reactivo (g/cc) = ";: ? USING "###.### ";CI;
  INPUT CI$: IF CI$ <> "" THEN CI = VAL(CI$)
?:?"      ¿La pared del molde es (1) adiabática, (2) isotérmica u (3) otra?"
  PARED$ = INPUT$(1)

  SELECT CASE VAL(PARED$)
    CASE 1: ?"      Pared adiabática. Número de Biot = 0.:BIOT = 0
    CASE 2: ?"      Para pared isotérmica, introduzca un Biot grande."
      INPUT"      Número de Biot (adimensional) ="; BIOT
    CASE ELSE: ?"      Número de Biot (adimensional) ="BIOT";: INPUT BIOT$
      IF BIOT$ <> "" THEN BIOT = VAL(BIOT$)
  END SELECT

?:?"      Espesor del molde (cm) = ";: ? USING "###.### ";ESP;
  INPUT ESP$: IF ESP$ <> "" THEN ESP = VAL(ESP$)

```

```

?:?"      ¿Todos los valores están correctos? (s/n)";: Z$ = INPUT$(1)
          IF Z$ = "n" OR Z$ = "N" THEN 1500

'Otras definiciones:

R = 1.9872 'cal/mol K
PI = 3.141592
DTAD = HR*CI/(DE*CP) 'Incremento de temperatura adiabático
GAMMA = EA/(R*DTAD) 'Energía de activación adimensional
DA = (ESP/2)^2 * FP * CI^(ORD-1) * DE * CP * EXP(-GAMMA)/KT 'N. Damkohler
ALPHA = KT/(DE*CP) 'Difusividad térmica, cm^2/s.
A0 = HR*FP*EXP(-EA/(R*TI)) 'Generación de calor (caso analítico)

CLS:?:?:?
?"El problema definido tiene las siguientes características:
?:?"      Incremento de temperatura adiabático ="DTAD"K"
?"      Energía de activación adimensional ="GAMMA
?"      Número de Damkohler ="DA
?"      Número de Biot ="BIOT
?"      Unidad de tiempo adimensional ="(ESP/2)^2/ALPHA"seg"
?"      Unidad de temperatura adimensional ="DTAD"K"
?"      Dif. de temp. adimensional en la pared ="(TW-TI)/DTAD
?:?"      ¿Todo está correcto? (s/n)": Z$ = INPUT$(1)
          IF Z$ = "n" OR Z$ = "N" THEN 1750

'XXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXX

1700 IF COMPARA = 2 THEN
    NINCTREF = NINCT: NINCZREF = NINCZ
    FOR J = 0 TO NINCT
        FOR I = 0 TO NINCZ
            THETAREF(I,J)= THETA(I,J)
            CONVREF(I,J) = CONV(I,J)
            DTAXREF(I,J) = DTAX(I,J)
        NEXT I
        TAUREF(J) = TAU(J)
    NEXT J
    FOR I = 0 TO NINCZ: ZREF(I) = Z(I): NEXT I

    METODOREF = METODO: METODOREF$ = METODO$
END IF

CLS:PRINT:PRINT
?"      SELECCION DE UN METODO NUMERICO
?:?
?"      1) Diferencias finitas hacia adelante (método de Euler).
?"      2) Diferencias finitas hacia atrás.
?"      3) Diferencias finitas centrales (método de Crank-Nicolson).
?"      4) Diferencias finitas ponderadas.
?"      5) Colocación ortogonal.
?"      6) Elementos finitos lineales.
?"      7) Elementos finitos de segundo grado.
?"      8) Elementos finitos con polinomios de Hermite.
?"      9) Solución analítica.
1750 ?
?"      m) Modificar condiciones iniciales y de frontera.
?"      r) Redefinir propiedades térmicas del sistema reactivo.
          IF COMPARA = 3 THEN
?"      c) Efectuar comparación del método "METODO" respecto del "METODOREF
          END IF
?"      s) Menú anterior.
?:?
          METOD$ = METODO$
          METODO$ = INPUT$(1): IF VAL(METODO$)<>0 THEN METODO = VAL(METODO$)

```

```

SELECT CASE METODO$
  CASE "m","M": GOTO 1500
  CASE "r","R": GOTO 1000
  CASE "c","C": METODO$ = METHOD$: GOTO COMPARA
  CASE "s","S": GOTO 800
END SELECT
GOSUB METODONOMBRE

IF METODO = 7 THEN P=2 ELSE P=1
'P es el número de nodos por cada incremento en distancia.

'Inicialización de algunas variables:

MAXTHETA = 0: MAXCONV = 0: MAXDTAX = 0
MINTHETA = 10: MINDTAX = 10
FOR I=0 TO NINCZ
  FOR J=0 TO NINCT
    THETA(I,J)=0: CONV(I,J)=0: DTAX(I,J)=0
  NEXT J
  THETA1(I) = 0
NEXT I
NTAU = 0

'THETA1 es la derivada de la temperatura en E.F.Hermite.

ON METODO GOTO 10000, 11000, 12000, 13000, 20000, 30000, 31000, 32000, 40000
GOTO 1700

'XXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXX

10000 CLS:?:?:?
? "          DIFERENCIAS FINITAS HACIA ADELANTE":PRINT
? "          (Método de Euler)
RHO = 1: GOSUB ENTRADATOS: GOTO 13050

11000 CLS:?:?:?
? "          DIFERENCIAS FINITAS HACIA ATRAS":?
RHO = 0: GOSUB ENTRADATOS: GOTO 13050

12000 CLS:?:?:?
? "          METODO DE CRANK NICOLSON":PRINT

RHO = .5:GOSUB ENTRADATOS: GOTO 13050

13000 CLS:?:?:?
? "          DIFERNCIAS FINITAS PONDERADAS":PRINT
13045 ??:
INPUT"¿Qué factor de peso (rho) se desea dar a diferencias hacia adelante?"; RHO
IF RHO < 0 THEN 13045 ELSE IF RHO > 1 THEN 13045
?:?"      Ponderación hacia adelante = "RHO
? "      Ponderación hacia atrás = "1-RHO
GOSUB ENTRADATOS

13050 GOSUB PRERKUTA
N = NINCZ + 1

FOR I = 2 TO NINCZ
  DA(I,I) = 1 + 2*(1-RHO)*DELTA
  DA(I,I+1) = (RHO-1)*DELTA
  DA(I,I-1) = (RHO-1)*DELTA
NEXT I
DA(1,1) = 1 + 2*(1-RHO)*DELTA
DA(1,2) = 2*(RHO-1)*DELTA
DA(NINCZ+1,NINCZ+1) = 1 + (1-RHO)*DELTA*(1+BIOT*DTAZ)

```

```

DA(NINCZ+1,NINCZ) = -(1-RHO)*DELTA

FOR I = 2 TO NINCZ
  DB(I) = RHO*DELTA*THETA(I-2,NTAU)_
          + (1-2*RHO*DELTA)*THETA(I-1,NTAU)_
          + RHO*DELTA*THETA(I,NTAU) + DTAX(I-1,NTAU)
NEXT I
DB(1) = (1-2*RHO*DELTA)*THETA(0,NTAU)_
          + 2*RHO*DELTA*THETA(1,NTAU) + DTAX(0,NTAU)
DB(NINCZ+1) = (RHO*DELTA)*THETA(NINCZ-1,NTAU)_
              + (1-RHO*DELTA*(1+BIOT*DTAZ))*THETA(NINCZ,NTAU)_
              + DTAX(NINCZ,NTAU) + DELTA*DTAZ*BIOT*TW/DTAD

GOSUB SBGAUSS

FOR I = 0 TO NINCZ
  THETA(I,NTAU+1) = DX(I+1)
NEXT I

GOSUB 53320
IF NTAU >= NINCT+1 THEN 53250 ELSE 13050

'XXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXX

20000 CLS:?:?:?
? "                                COLOCACION ORTOGONAL"
20050 ??:?:?
?"¿Cuántos puntos de colocación interiores se desea usar en la mitad del espesor?
(def: "NPCI");
INPUT NPCI$
IF NPCI$ <> "" THEN NPCI = VAL (NPCI$)
IF NPCI<1 THEN 20050

IF NPCI>9 THEN
  ?:"El número máximo de puntos de colocación interior es 9.":GOTO 20050
END IF

GOSUB 21000

?:?"Los puntos de colocación serán:"
?
FOR I = 1 TO NPCI+1
  PRINT "          X("I") = "ZPC(I)
NEXT I

NINCZ = NPCI + 1
GOSUB ENTRADATOS2
IF COMPARA = 0 THEN FOR I = 1 TO NINCZ: Z(I) = ZPC(I): NEXT I: Z(0) = 0

20380 GOSUB PRERKUTA

N = NPCI + 1 'dato para la subrutina de eliminación gaussiana.
FOR I = 1 TO NPCI
  FOR J = 1 TO NPCI + 1
    DA(I,J) = -DTAT*DMATRIZ(I,J)
  NEXT J
  DA(I,I) = 1 + DA(I,I)
NEXT I
FOR J = 1 TO NPCI
  DA(NPCI+1,J) = DMATRIZ(NPCI+1,J)
NEXT J
DA(NPCI+1,NPCI+1) = DMATRIZ(NPCI+1,NPCI+1) + BIOT
FOR I = 1 TO NPCI
  DB(I) = THETA(I,NTAU) + DTAX(I,NTAU)
NEXT I

```

```

DB(NPCI+1) = BIOT * TW / DTAD
GOSUB SBGAUSS
FOR I = 1 TO NPCI+1
    THETA(I,NTAU+1) = DX(I)
NEXT I

GOSUB 53320
IF NTAU < NINCT+1 THEN 20380

?"Interpolando";

FOR J = 0 TO NINCT

'Obtención de los coeficientes de los polinomios ajustados:
FOR I = 1 TO NPCI+1
    DS = 0: FOR K = 1 TO NPCI+1: DS = DS + DQINV(I,K)*THETA(K,J): NEXT K
    DT(I) = DS
    DS = 0: FOR K = 1 TO NPCI+1: DS = DS + DQINV(I,K)*CONV(K,J): NEXT K
    DC(I) = DS
    DS = 0: FOR K = 1 TO NPCI+1: DS = DS + DQINV(I,K)*DTAX(K,J): NEXT K
    DD(I) = DS
NEXT I

IF COMPARA = 0 THEN
'Interpolación de resultados en el centro del molde:
    THETA(0,J) = DT(1)
    CONV(0,J) = DC(1)
    DTAX(0,J) = DD(1)
ELSE
'Interpolación para obtener resultados en nodos equidistantes:
    FOR I = 0 TO NPCI+1
        DS = 0: FOR K = 1 TO NPCI+1: DS = DS + DT(K)*Z(I)^(2*K-2): NEXT K
        THETA(I,J) = DS
        DS = 0: FOR K = 1 TO NPCI+1: DS = DS + DC(K)*Z(I)^(2*K-2): NEXT K
        CONV(I,J) = DS
        DS = 0: FOR K = 1 TO NPCI+1: DS = DS + DD(K)*Z(I)^(2*K-2): NEXT K
        DTAX(I,J) = DS
    NEXT I
END IF
?".";
NEXT J

IF COMPARA <> 0 THEN
    MAXTHETA = 0: MAXCONV = 0: MAXDTAX = 0

    MINTHETA = 10: MINDTAX = 10
    FOR J = 0 TO NINCT
        NTAU = J: GOSUB MAXMIN
    NEXT J
END IF

GOTO 53250

21000 SELECT CASE NPCI
CASE 1: RESTORE 21510
CASE 2: RESTORE 21520

CASE 3: RESTORE 21530
CASE 4: RESTORE 21540
CASE 5: RESTORE 21550
CASE 6: RESTORE 21560
CASE 7: RESTORE 21570
CASE 8: RESTORE 21580

```

```

CASE 9: RESTORE 21590
END SELECT
FOR I = 1 TO NPCI+1
  READ ZPC(I)
NEXT I
FOR I = 1 TO NPCI+1
  FOR J = 1 TO NPCI+1
    READ DQINV(I, J)
  NEXT J
NEXT I
FOR I = 1 TO NPCI+1
  FOR J = 1 TO NPCI+1
    READ DMATRIZ(I, J)
  NEXT J
NEXT I
RETURN

21510 DATA 0.447213596, 1
      DATA 1.25, -.25, -1.25, 1.25
      DATA -2.5, 2.5, -2.5, 2.5
21520 DATA .285231517, .765055324, 1
      DATA 1.264297284766302, -.3892972847615505, .125
      DATA -3.424345880805107, 5.174345880546522, -1.75
      DATA 2.160048596038805, -4.785048595784971, 2.625
      DATA -4.739870411377822, 5.67712434343954437, -.9372539325766166
      DATA 8.322875655585419, -23.26012958609335, 14.93725393050793
      DATA 1.791502622545005, -8.791502622046842, 7
21530 DATA .209299218, .591700181, .871740149, 1
      DATA 1.268503660156015, -.4080587069243187, .2176800467457292, -7.8125E-2
      DATA -6.560905952523439, 10.26012509883516, -5.808594145771718, 2.109375
      DATA 10.06016051228747, -22.10988927402556, 19.7841037603412, -7.734375
      DATA -4.767758219920044, 12.25782288211472, -14.19318966131521, 6.703125
      DATA -8.107924540530821, 9.603332804380342, -2.034293656714867, .5388853928653432
      DATA 11.61159653317452, -27.29464368995103, 19.30945347661549, -3.626406319838992
      DATA -3.982180716008499, 31.26132232487118, -77.09743175881687, 49.81829014995421
      DATA -1.487719175417269, 5.627630394256393, -17.63991121806991, 13.5
21540 DATA .165278958, .477924950, .738773865, .919533908, 1
      DATA 1.27030727247887818, -.4148181874478059, .2354871648682823, -
      .145663725307686, 5.46875E-2
      DATA -10.66161054942795, 16.8507241801746, -
10.16545878440331, 6.382595152809803, -2.40625
      DATA 28.91115823738578, -63.11670980027984, 59.0854360623688, -
40.52050949301495, 15.64062499354022
      DATA -31.57106968206058, 79.58597196529013, -
93.79063582525504, 77.05698352719268, -31.2812499851672
      DATA 12.05121474621493, -32.90516815773708, 44.63517138242127, -
42.77340546167986, 18.99218749078073
      DATA -12.53899873194646, 14.75554744653166, -
3.011097048996564, 1.158569593944579, -.3640212595332153
      DATA 16.54904833791335, -36.69184211426128, 24.60810918316097, -
6.236849966098176, 1.771534559285137
      DATA -4.385508015711361, 31.95624204225802, -
65.13217355163569, 46.56659796740497, -9.005158442315972
      DATA 2.846665808160739, -13.66349986286913, 78.55859665098396, -
193.6369854550382, 125.8952228587624
      DATA 1.304711728043216, -4.490904310926055, 10.3483827885085, -
29.16219019672292, 22
21550 DATA .136552933, .399530941, .632876153, .819279324, .944899270, 1
      DATA 1.271245370065238, -.418067152103632, .2427116579948546, -
      .161652747382995, .1067784953958875, -4.101562396935201E-2
      DATA -15.7268532960374, 24.97337345978393, -
15.41299655786881, 10.42824659964762, -6.92778576206885, 2.666015556543523
      DATA 65.52844880420132, -142.4677224901377, 135.0575456649217, -
100.045424882766, 68.58730846667945, -26.66015556289887

```

DATA -121.5508467421579, 303.1568044232215, -356.9601360444516,
 313.276423709058, -228.5667742589235, 90.64452891325367
 DATA 103.656453998244, -278.6496844587512, 373.1398469858691, -
 375.367490000798, 300.2384484190774, -123.0175749436414
 DATA -33.1784481343153, 93.40529621798701, -
 136.0669717064652, 151.8698973222414, -133.4379753601603, 57.40820166071242
 DATA -18.02165329811602, 21.13017699569249, -
 4.194906793687072, 1.60343342418769, -.7850653586249803, .268015030547923
 DATA 22.82291121488263, -49.22523485001719, 32.05326646529547, -
 7.933060189553159, 3.393457458946052, -1.111340099553788
 DATA -5.35752742617433, 37.90063439845353, -
 72.15010126076389, 48.81053965900897, -12.96552989791531, 3.761984527390981
 DATA 2.75476725752574, -12.61837906474235, 65.66019985769292, -
 133.0826144711517, 96.06371805770485, -18.77767110525657
 DATA -2.323955648305692, 9.300291379469963, -
 30.05178428066476, 165.5201674605923, -410.0203804960629, 267.5756615849718
 DATA -1.177841185417577, 3.872170008207007, -
 7.907567900459981, 16.09238913860889, -43.37914945994521, 32.5
 21560 DATA .116331869, .342724014, .550639402, .728868599, .867801056, .959935043, 1
 DATA 1.271795393286126, -.419891758845086, .2464285476549453, -
 .1687233080368601, .1209592080817407, -8.279464362743909E-2, 3.222656148657265E-2
 DATA -21.75675726184445, 34.63537859219659, -
 21.6122488275716, 15.03622387455878, -10.84255051, 7.441743717, -2.900390533175847
 DATA 128.331273026457, -278.2820607207148, 265.0953455386397, -
 202.0038050365443, 150.7062178339208, -104.9358365304985, 41.08886588873955
 DATA -354.5700960598708, 878.6932097073566, -
 1031.810617278736, 924.8319257135263, -735.4993232488622, 526.5384883362418, -
 208.1835871696553
 DATA 501.1389624990255, -1334.824774959452, 1770.740151806639, -
 1801.483901043487, 1562.881884311144, -1166.865393740246, 468.4130711263764
 DATA -351.2811148763847, 977.7747364085565, -
 1403.174567236703, 1568.252059025589, -1480.030480009853, 1167.28161717001, -
 478.8222504812158
 DATA 96.86593727933122, -277.5765972690975, 420.5155074500759, -
 504.4637792256062, 512.6674102216181, -429.3805430637659, 181.3720646074444
 DATA -24.55249850979846, 28.72402789789945, -
 5.601306586852268, 2.103597139908245, -1.047664291027474, .5821598923753648, -
 .2083155425048571
 DATA 30.36081839693252, -64.48418559555883, 41.26184321132224, -
 9.973942942147829, 4.295742931862248, -2.248586962341752, .7883109599311016
 DATA -6.658933013954782, 46.40831389890113, -
 85.41608942724088, 55.95370185465687, -14.61149601579726, 6.479274727437404, -
 2.154772024002827
 DATA 3.044709135738621, -13.65783891087875, 68.1234725016683, -
 128.480887178544, 87.77212651056715, -23.75575179818765, 6.954169739635466
 DATA -2.081306212716155, 8.073911113496589, -
 24.41704847844365, 120.4722662055748, -245.0283556436602, 177.9386287331668, -
 34.95809571741634
 DATA 2.017370501652952, -7.371994005000714, 18.88663520821624, -
 56.87600439291941, 310.3846620770606, -772.037946104408, 504.9972767153996
 DATA 1.082799803246587, -3.468230273549352, 6.654812314000765, -
 11.86718691517967, 22.89479226045069, -60.29698614783001, 45
 21570 DATA
 .101326274, .299830469, .486059421, .652388717, .792008236, .899200617, .969568006, 1
 DATA 1.272145444090444, -.4210230161523615, .2486153200364738, -
 .1725520073668476, .1276602488109327, -9.537287513551401E-2, 6.671094864239344E-2, -
 2.618406292551089E-2
 DATA -28.75137110070484, 45.83943681064898, -
 28.78151518653311, 20.30081905836933, -15.11571492502472, 11.32679128919934, -
 7.93434943518008, 3.115903489254054
 DATA 227.342592246145, -492.131569680239, 469.8798817919463, -
 362.9757219143796, 279.7340416314277, -212.9788760964301, 150.3318183213588, -
 59.20216629982682

DATA -867.5562976364087,2141.15040593322,-
2508.076016516253,2268.286340463222,-1863.168831312023,1461.699976031734,-
1046.750741067003,414.415164103506
DATA 1790.244983119333,-4740.520057667233,6247.551368955688,-
6374.720730675113,5688.945975734037,-4661.364327684495,3411.512613135401,-
1361.649824917614
DATA -2045.728212088738,5653.200095586532,-
8032.405709423845,8950.783383127848,-8633.970728969816,7460.794448296059,-
5622.089652284879,2269.416375756838
DATA 1218.340907165447,-3462.46154547619,5178.94786488739,-
6161.1514111439,6353.114567291597,-5802.078682546676,4532.083515714091,-
1856.795215891759
DATA -295.1647471491635,855.3442575094432,-1327.36448982843,1659.64987309132,-
1809.66696969901,1742.696043585744,-1417.219915332432,591.7259478225274
DATA -32.13022897812736,37.53556993032986,-
7.232590846397937,2.677134477144146,-1.322768531657467,.7609651378203701,-
.4561759473501824,.1680947582367727
DATA 39.13789697493137,-82.34042536410104,52.10422778684962,-
12.38173290627271,5.26912224918943,-2.837076920921325,1.648665645838575,-
.6006774655146405
DATA -8.229567891469925,56.85931739456446,-
102.630461491866,65.90692132104363,-16.85279755015035,7.576011776287763,-
4.073868810930766,1.444445252519535
DATA 3.510229353516947,-15.57012735111673,75.94738663736565,-
138.103689519268,91.28919739854848,-24.37933044132808,10.98587858531059,-
3.679544663030863
DATA -2.14994613980806,8.213494001886897,-
24.07319112097067,113.1620386441742,-213.8394243170278,147.0452431470686,-
40.16960330149052,11.8113890861476
DATA 1.719209050281344,-6.147232743221963,15.04245453945557,-
42.00651615437464,204.390149134366,-417.2711881264366,304.2028797727411,-
59.92975547285869
DATA -1.811694137050154,6.279598159275537,-
14.21935038384873,33.27588708471791,-98.15469407812348,534.7797557515148,-
1334.182945405891,874.0334430093035
DATA -1.007989070927124,3.176584444981927,-
5.874223845081815,9.76606866780412,-16.41050330930511,30.76821550802106,-
79.91811583747176,59.49996344198098
21580 DATA
.089749094,.266362653,.434415037,.588504836,.723679311,.8355936,.92064909,.976105605
,1
DATA 1.272381981696383,-.4217744711765199,.2500192180192953,-
.1748847213124932,.1314421832225415,-.1016389757003674,7.791557007105394E-2,-
5.528087726164808E-2,2.182009244158137E-2
DATA -36.71071723487129,58.58674365158771,-
36.9280995482105,26.25240837583802,-19.85967209989399,15.40519388485992,-
11.82915671820259,8.39995373903853,-3.316654050124151
DATA 374.1890610590934,-809.0400271315978,773.3941195832173,-
602.0532015889868,471.548903880388,-371.8890399971298,288.0446026459069,-
205.4524426677733,81.25802421686708
DATA -1876.337510024152,4617.90809372808,-
5398.748695277621,4904.620861027819,-4092.407238367664,3328.109172252159,-
2619.769699212481,1884.198838604192,-747.5738227303383
DATA 5260.029113265927,-13873.081579025,18198.56682594819,-
18578.93534379924,16793.16014428193,-14261.32880446522,11495.80804901454,-
8371.601542247314,3337.383137026176
DATA -8654.510244083454,23799.58074657703,-
33584.09177021871,37301.35131757815,-36288.22352841935,32429.95351310702,-
26955.57485671514,19961.23435085804,-8009.719528683547
DATA 8303.395214682962,-23466.41708497638,34795.27958238261,-
41117.4046074177,42561.34927983543,-40043.68386622547,34500.45911346516,-
26091.24428275546,10558.26665100882
DATA -4300.500516282411,12385.86108186952,-
19025.34120331274,23557.59036790369,-25666.58331523968,25337.36456330792,-
22684.52313651284,17589.67647125856,-7193.544312992023

DATA 929.1732166352105, -2712.976200222061, 4277.619221225243, -
5491.246917358249, 6240.883983945615, -6433.829092888443, 5987.307168462979, -
4775.156065912026, 1978.224686111732
DATA -40.75425266788727, 47.56404097332991, -
9.089169998466106, 3.327851675356803, -1.627713544791117, .9367445464619059, -
.5891180855261211, .3710463179053562, -.1394292163415098
DATA 49.14356572554448, -102.7421498005801, 64.52721173675661, -
15.14847244128002, 6.369356037700312, -3.421011022437881, 2.076712323612007, -
1.284711035538586, .479498476252568
DATA -10.04761308429108, 69.03886713974271, -
123.0772133588612, 78.00770961534843, -19.62755456635086, 8.747386273101522, -
4.867642491588652, 2.886846578888726, -1.060786105987837
DATA 4.096900438149686, -18.04979822521263, 86.8740849133539, -
154.6002673685002, 100.0889625669928, -26.21817729180303, 12.02347272888393, -
6.551259123699537, 2.336081361785606
DATA -2.345903598094375, 8.88464189159925, -
25.58939935545048, 117.1730717574716, -213.2012358955744, 141.8373977134793, -
38.31705644606198, 17.41275890187923, -5.854274969324003
DATA 1.693603236766172, -5.986272703458727, 14.30633932195075, -
38.50337073659899, 177.92746326, -337.2749908126432, 232.952371373759, -
63.97303358626824, 18.85789064637921
DATA -1.492943371541998, 5.093668801568839, -
11.15898551475863, 24.75065585341812, -67.37670733852585, 326.5422380502595, -
668.6777194983746, 488.7749840493885, -96.45519103158816
DATA 1.661908901023352, -5.5692254220547, 11.69657914625157, -
23.83432606319241, 54.11248220639015, -158.4797878086679, 863.7799761026757, -
2159.676198567504, 1416.308591505117
DATA .9470293197427964, -2.952302380705078, 5.330694786040112, -
8.493214142596116, 13.24739897726977, -21.55403796717292, 39.71787264714658, -
102.2435110040242, 76.00006976431541
21590 DATA
.0805459372, .2395517059, .3923531839, .5349928577, .6637764706, .7753679212, .8668788347,
.9359334506, .9807441739, 1
DATA 1.272549296438443, -.4222997762271809, .250977818793683, -
.1764218964562178, .1338137414862861, -.1052989461506086, 8.374325597802762E-2, -
6.531844084530593E-2, 4.680224785859431E-2, -1.854730117648165E-2
DATA -45.63480714613659, 72.87789802791562, -
46.0554351194947, 32.90376902828228, -25.12090236079232, 19.83165050062234, -
15.79978071672022, 12.33593685121217, -8.84376898993741, 3.505439925166503
DATA 582.1010183916945, -1257.482933225388, 1202.926401267623, -
940.9242771719851, 743.8599285421932, -597.2271643790194, 480.1784719543159, -
376.8482879634633, 270.9170003084585, -107.5001577244755
DATA -3700.972238388154, 9090.473371991175, -
10611.58447444386, 9664.743372819657, -8135.778066011188, 6737.228036051182, -
5509.116916053419, 4365.212492754405, -3154.374085589835, 1254.168506869711
DATA 13444.84300330434, -35360.29408718757, 46228.37963419874, -
47184.04105134996, 42935.17709918362, -37110.0352039838, 31094.55978300893, -
24988.08463249839, 18195.75610241579, -7256.260647091206
DATA -29697.74668214037, 81386.29739375373, -
114280.9279317536, 126570.3973586443, -123594.3253744714, 112212.0409776153, -
96954.31424712061, 79370.77799551746, -58393.48379752082, 23381.28430747565
DATA 40608.38302193547, -114312.4820272514, 168451.920271878, -
198032.5446062192, 205107.4422225245, -195490.7712830184, 174893.498412741, -
146437.3954467598, 109140.4229881515, -43928.47355398146
DATA -33581.80848012552, 96300.20111613032, -
146854.8891063337, 180533.330206389, -196206.848446982, 195546.7405621838, -
181388.7670965182, 155836.6636528493, -117974.9397884241, 47790.31738082847
DATA 15390.43945240122, -44727.7436063474, 69953.49978646432, -
88997.85760876602, 100605.8805351731, -104328.1972678461, 100274.2466070739, -
88580.13907368291, 68287.55632635659, -27877.68515082657
DATA -3000.876837528979, 8808.575173884805, -
14043.52012397681, 18354.16925852237, -21430.42080933941, 23010.49499182264, -
22874.56897762507, 20797.54268137276, -16363.0577789582, 6741.662421825888

DATA -50.42426892002942,58.80903396066812, -
11.1710926722513,4.056828430404457, -1.966785999358342,1.12524695382271, -
.7128196487572869,.4757931293540829, -.3100623411230873,.118127107501393
DATA 60.37266050309771, -125.6648725145225,78.50553847169753, -
18.2676547506027,7.605546203384727, -4.055214330689609,2.474567649078041, -
1.617580227769169,1.042449533893652, -.3954405373907073
DATA -12.1033927715314,82.85438492072504, -
146.4657595188621,91.98960907587204, -22.87022116116033,10.0875354048341, -
5.618111397324458,3.498399286222929, -2.198356336484022,.8259124977170553
DATA 4.78433812924168, -20.98562049138677,100.1296560531506, -
175.7113581889496,112.1733408550003, -28.93456589331191,13.18288211555966, -
7.459712236584011,4.471811777474942, -1.65077212040131
DATA -2.619105532013744,9.865736322311024, -
28.10951019969946,126.6621575784578, -225.2982657146389,146.7427648796465, -
38.92852210004942,18.04633656231653, -9.904974063368776,3.543382266781689
DATA 1.773330365911182, -6.225324690112565,14.67314243092029, -
38.66672684625745,173.6726497340835, -316.7824858981307,211.6985226389808, -
57.57691570731184,26.2940824400034, -8.86027446808038
DATA -1.421420835838184,4.806596689715803, -
10.33945396175343,22.28799911835512, -58.28424003291087,267.7824041987412, -
509.0220365256573,352.6621797519772, -97.15692863903291,28.68490023617242
DATA 1.336583748867582, -4.426545861771046,9.071651357047358, -
17.77294370753236,38.08276860923365, -102.6697299039158,497.2695577468016, -
1020.687340476687,747.4800941817673, -147.6840956926558
DATA-1.547632693028334,5.06821351637268, -10.12604017434228,18.92086357580934, -
37.11010552661855,83.21840556825964, -243.0939945268046,1325.944654146376, -
3320.518306767379,2179.243942881312
DATA -.8960616571466744,2.772262314218096, -
4.924230066808377,7.628369891739567, -11.36503065988654,17.11704569555877, -
27.30565950428718,49.74543811778858, -127.2731857906074,94.50105165944842

'XX'

```

30000 CLS:?:?:?
      ?"          ELEMENTOS FINITOS LINEALES"
      GOSUB ENTRADATOS
30240 GOSUB PRERKUTA
      N = NINCZ+1
      FOR I = 2 TO NINCZ
        DA(I,I) = (6*DTAT + 2*DTAZ^2)/(3*DTAZ)
        DA(I,I+1) = (-6*DTAT + DTAZ^2)/(6*DTAZ)
        DA(I,I-1) = (-6*DTAT + DTAZ^2)/(6*DTAZ)
      NEXT I
      DA(1,1) = (3*DTAT + DTAZ^2)/(3*DTAZ)
      DA(1,2) = (-6*DTAT + DTAZ^2)/(6*DTAZ)
      DA(NINCZ+1,NINCZ+1) = (3*DTAT + DTAZ^2)/(3*DTAZ)
      DA(NINCZ+1,NINCZ) = (-6*DTAT + DTAZ^2)/(6*DTAZ)
      FOR I = 2 TO NINCZ
        DB(I) = DTAZ/6*(THETA(I-2,NTAU) + 4*THETA(I-1,NTAU) + THETA(I,NTAU)_
          + DTAX(I-2,NTAU) + 4*DTAX(I-1,NTAU) + DTAX(I,NTAU))
      NEXT I
      DB(1) = DTAZ/6*(THETA(1,NTAU) + 2*THETA(0,NTAU)_
        + DTAX(1,NTAU) + 2*DTAX(0,NTAU))
      DB(NINCZ+1) = DTAZ/6*(THETA(NINCZ-1,NTAU) + 2*THETA(NINCZ,NTAU)_
        + DTAX(NINCZ-1,NTAU) + 2*DTAX(NINCZ,NTAU))_
        + DTAT*BIOT*(TW/DTAD - THETA(NINCZ,NTAU))
      GOSUB SBGAUSS

      FOR I = 0 TO NINCZ
        THETA(I,NTAU+1) = DX(I+1)
      NEXT I

      GOSUB 53320
      IF NTAU >= NINCT+1 THEN 53250 ELSE 30240

```

```
'XXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXX'
```

```
31000 CLS:PRINT:PRINT:PRINT
      ?"ELEMENTOS FINITOS DE SEGUNDO GRADO":PRINT
```

```
? "Nota: este método tiene tres nodos en cada elemento (en vez de dos).
? "Los resultados originales se muestran completos, pero en las
? "comparaciones sólo se muestran y se utilizan los resultados de los
? "nodos nominales.
```

```
GOSUB ENTRADATOS
```

```
31240 GOSUB PRERKUTA
```

```
      N = 2*NINCZ + 1
```

```
      FOR I = 1 TO 2*NINCZ+1
```

```
        DA(2*I,2*I) = (8*DTAZ^2 + 80*DTAT)/(15*DTAZ)
```

```
        DA(2*I,2*I+1) = (DTAZ^2 - 40*DTAT)/(15*DTAZ)
```

```
        DA(2*I,2*I-1) = (DTAZ^2 - 40*DTAT)/(15*DTAZ)
```

```
        DA(2*I+1,2*I+1) = (4*DTAZ^2 + 70*DTAT)/(15*DTAZ)
```

```
        DA(2*I+1,2*I+2) = (DTAZ^2 - 40*DTAT)/(15*DTAZ)
```

```
        DA(2*I+1,2*I+3) = (-DTAZ^2 + 10*DTAT)/(30*DTAZ)
```

```
        DA(2*I+1,2*I) = (DTAZ^2 - 40*DTAT)/(15*DTAZ)
```

```
        DA(2*I+1,2*I-1) = (-DTAZ^2 + 10*DTAT)/(30*DTAZ)
```

```
      NEXT I
```

```
      DA(1,1) = (2*DTAZ^2 + 35*DTAT)/(15*DTAZ)
```

```
      DA(1,2) = (DTAZ^2 - 40*DTAT)/(15*DTAZ)
```

```
      DA(1,3) = (-DTAZ^2 + 10*DTAT)/(30*DTAZ)
```

```
      DA(2*NINCZ+1,2*NINCZ+1) = (2*DTAZ^2 + 35*DTAT)/(15*DTAZ)
```

```
      FOR I = 1 TO NINCZ-1
```

```
        DB(2*I) = (THETA(2*I-2,NTAU) + DTAX(2*I-2,NTAU))_
                  + 8*(THETA(2*I-1,NTAU))_
                  + DTAX(2*I-1,NTAU)) + THETA(2*I,NTAU)_
                  + DTAX(2*I,NTAU))*(DTAZ/15)
```

```
        DB(2*I+1) = (- (THETA(2*I-2,NTAU) + DTAX(2*I-2,NTAU))_
                    + 2*(THETA(2*I-1,NTAU) + DTAX(2*I-1,NTAU))_
                    + 8*(THETA(2*I,NTAU) + DTAX(2*I,NTAU))_
                    + 2*(THETA(2*I+1,NTAU) + DTAX(2*I+1,NTAU))_
                    - (THETA(2*I+2,NTAU) + DTAX(2*I+2,NTAU)))*(DTAZ/30)
```

```
      NEXT I
```

```
      DB(1) = (4*(THETA(0,NTAU) + DTAX(0,NTAU))_
              + 2*(THETA(1,NTAU) + DTAX(1,NTAU))_
              - (THETA(2,NTAU) + DTAX(2,NTAU)))*(DTAZ/30)
```

```
      DB(2*NINCZ) = (THETA(2*NINCZ-2,NTAU) + DTAX(2*NINCZ-2,NTAU))_
                    + 8*(THETA(2*NINCZ-1,NTAU) + DTAX(2*NINCZ-1,NTAU))_
                    + THETA(2*NINCZ,NTAU) + DTAX(2*NINCZ,NTAU))*(DTAZ/15)
```

```
      DB(2*NINCZ+1) = (- (THETA(2*NINCZ-2,NTAU) + DTAX(2*NINCZ-2,NTAU))_
                      + 2*(THETA(2*NINCZ-1,NTAU) + DTAX(2*NINCZ-1,NTAU))_
                      + 4*(THETA(2*NINCZ,NTAU) + DTAX(2*NINCZ,NTAU)))*(DTAZ/30)_
                      + DTAT*BIOT*(TW/DTAD - THETA(2*NINCZ,NTAU))
```

```
GOSUB SBGAUSS
```

```
      FOR I = 0 TO 2*NINCZ
```

```
        THETA(I,NTAU+1) = DX(I+1)
```

```
      NEXT I
```

```
GOSUB 53320
```

```
      IF NTAU >= NINCT+1 THEN
```

```
        IF COMPARA <> 0 THEN
```

```
          'Asigna los valores a los nodos "comparables" y desecha los demás.
```

```
          FOR J = 0 TO NINCT
```

```
            FOR I = 0 TO NINCZ
```

```
              THETA(I,J) = THETA(2*I,J)
```

```

        CONV(I, J) = CONV(2*I, J)
        DTAX(I, J) = DTAX(2*I, J)
        Z(I) = I/NINCZ
    NEXT I
    FOR I = NINCZ+1 TO 2*NINCZ
        THETA(I, J) = 0
        CONV(I, J) = 0
        DTAX(I, J) = 0
        Z(I) = 0
    NEXT I
    P=1
NEXT J
END IF
GOTO 53250
ELSE
    GOTO 31240
END IF

```

'XXX

```

32000 CLS:?:?:?
      ?"      ELEMENTOS FINITOS CON POLINOMIOS DE HERMITE"
      GOSUB ENTRADATOS
32240 GOSUB PRERKUTA
      N = 2*NINCZ + 1
      DA(1,1) = (13*DTAZ^2 + 42*DTAT)/(35*DTAZ)
      DA(1,2) = (9*DTAZ^2 - 84*DTAT)/(70*DTAZ)
      DA(1,3) = (-13*DTAZ^2 + 42*DTAT)/(420*DTAZ)
      DA(2,1) = DA(1,2)
      DA(2,2) = (26*DTAZ^2 + 84*DTAT)/(35*DTAZ)
      DA(2,3) = 0
      DA(2,4) = DA(1,2)
      DA(2,5) = DA(1,3)
      DA(3,1) = DA(1,3)
      DA(3,2) = 0
      DA(3,3) = (2*DTAZ^2 + 28*DTAT)/(105*DTAZ)
      DA(3,4) = -DA(1,3)
      DA(3,5) = (-3*DTAZ^2 - 14*DTAT)/(420*DTAZ)
      FOR I = 2 TO NINCZ-1
          DA(2*I, 2*I-2) = DA(1,2)
          DA(2*I, 2*I-1) = -DA(1,3)
          DA(2*I, 2*I) = DA(2,2)
          DA(2*I, 2*I+1) = 0
          DA(2*I, 2*I+2) = DA(1,2)
          DA(2*I, 2*I+3) = DA(1,3)
          DA(2*I+1, 2*I-2) = DA(1,3)
          DA(2*I+1, 2*I-1) = DA(3,5)
          DA(2*I+1, 2*I) = 0
          DA(2*I+1, 2*I+1) = DA(3,3)
          DA(2*I+1, 2*I+2) = -DA(1,3)
          DA(2*I+1, 2*I+3) = DA(3,5)
      NEXT I
      DA(2*NINCZ, 2*NINCZ-2) = DA(1,2)
      DA(2*NINCZ, 2*NINCZ-1) = -DA(1,3)
      DA(2*NINCZ, 2*NINCZ) = DA(1,1)
      DA(2*NINCZ, 2*NINCZ+1) = (-11*DTAZ^2 - 21*DTAT)/(210*DTAZ)
      DA(2*NINCZ+1, 2*NINCZ) = BIOT
      DA(2*NINCZ+1, 2*NINCZ+1) = 1/DTAZ

      DB(1) = DTAZ/420*(156*(THETA(0,NTAU)+DTAX(0,NTAU))_
          + 54*(THETA(1,NTAU)+DTAX(1,NTAU)) - 13*THETA1(1))
      DB(2) = DTAZ/420*(54*(THETA(0,NTAU)+DTAX(0,NTAU))_
          + 312*(THETA(1,NTAU)+DTAX(1,NTAU))_
          + 54*(THETA(2,NTAU)+DTAX(2,NTAU)) -13*THETA1(2))
      DB(3) = DTAZ/420*(-13*(THETA(0,NTAU)+DTAX(0,NTAU))_

```

```

      + 13*(THETA(2,NTAU)+DTAX(2,NTAU)) + 8*THETA1(1) - 3*THETA1(2))
FOR I = 2 TO NINCZ-1
  DB(2*I) = DTAZ/420*(54*(THETA(I-1,NTAU)+DTAX(I-1,NTAU))_
    + 312*(THETA(I,NTAU)+DTAX(I,NTAU))_
    + 54*(THETA(I+1,NTAU)+DTAX(I+1,NTAU))_
    + 13*THETA1(I-1) - 13*THETA1(I+1))
  DB(2*I+1) = DTAZ/420*(-13*(THETA(I-1,NTAU)+DTAX(I-1,NTAU))_
    + 13*(THETA(I+1,NTAU)+DTAX(I+1,NTAU))_
    - 3*THETA1(I-1) + 8*THETA1(I) - 3*THETA1(I+1))
NEXT
DB(2*NINCZ) = DTAZ/420*(54*(THETA(NINCZ-1,NTAU)+DTAX(NINCZ-1,NTAU))_
  + 156*(THETA(NINCZ,NTAU)+DTAX(NINCZ,NTAU))_
  + 13*THETA1(NINCZ-1) - 22*THETA1(NINCZ))_
  + DTAT*BIOT*(TW/DTAD - THETA(NINCZ,NTAU))
DB(2*NINCZ+1) = BIOT*(TW/DTAD)

GOSUB SBGAUSS
THETA(0,NTAU+1) = DX(1)
THETA1(0) = 0
FOR I = 1 TO NINCZ
  THETA(I,NTAU+1) = DX(2*I)
  THETA1(I) = DX(2*I+1)
NEXT I

GOSUB 53320
32700 IF NTAU >= NINCT+1 THEN 53250 ELSE 32240

'XXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXX

40000 CLS:?:?
?"
?" SOLUCION ANALITICA"
?:?
?"
?" ADVERTENCIA:
?
?"No existen soluciones analíticas para muchos casos prácticos. La que se
?"maneja en esta parte del paquete corresponde al caso en que las paredes son
?"isotérmicas (número de Biot muy grande) y se encuentran a la misma tempera-
?"tura inicial que la resina. La velocidad de la reacción química es indepen-
?"diente de la temperatura y de la concentración, lo que físicamente significa-
?"ría una reacción de orden cero (independencia de la concentración) y una
?"energía de activación nula (independencia de la temperatura). Tómese en
?"cuenta lo anterior si se quiere hacer una comparación con los métodos numé-
?"ricos.
?(Ref.: Carslaw & Jaeger, Conduction of Heat in Solids, 1959, p.130)
?
?"NOTA: Las siguientes preguntas son sólo para las gráficas y no para obtener
?"la solución analítica."

GOSUB ENTRADATOS

40200 ?:"Haciendo los cálculos";

FOR I = 1 TO NINCZ: THETA(I,0) = 0: NEXT
FOR J = 1 TO NINCT
  TAU(J) = J*DTAT
  TIEMPO = TAU(J)*(ESP/2)^2/ALPHA
  FOR I = 0 TO NINCZ
    SUMA = 0: SUMA1 = 0
    Z = I*DTAZ*ESP/2
    FOR N = 0 TO 100
      SUMA = SUMA + (-1)^N/(2*N+1)^3 * COS((2*N+1)*PI*Z/ESP)_
        * EXP(-ALPHA*((2*N+1)*PI/ESP)^2*TIEMPO)
    IF ABS(SUMA-SUMA1) < 0.0000001 THEN N = 100
    SUMA1 = SUMA
  
```

```

        NEXT N
        THETA(I,J) = A0*ESP^2/(8*KT) * (1 - 4*(Z/ESP)^2 - 32/PI^3*SUMA)
    NEXT I
    ?". ";
NEXT J

'Adimensionalizaci#n:
FOR J=0 TO NINCT
    FOR I=0 TO NINCZ
        THETA(I,J) = (THETA(I,J)+TI)/DTAD
    NEXT I
    GOSUB 53320
NEXT J

GOTO 53250

'XXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXX

ENTRADATOS:

?
?"¿En cuántos incrementos se quiere dividir la mitad del espesor?(def:"NINCZ");
INPUT NINCZ$
IF NINCZ$ <> "" THEN NINCZ = VAL(NINCZ$)

ENTRADATOS2:
DTAZ = 1/NINCZ: NPCI = NINCZ - 1
IF DTAT = 0 THEN DTAT = DTAZ^2/6
FOR I = 0 TO P*NINCZ: Z(I) = I*DTAZ/P: NEXT
?
?"¿De qué tamaño se desea el incremento de tiempo adimensional? (def: "DTAT")";
INPUT DTAT$
IF DTAT$ <> "" THEN DTAT = VAL(DTAT$)
DELTA = DTAT/DTAZ^2
?
?"¿Cuántos incrementos de tiempo se desea calcular en total? (def:"NINCT") ";
INPUT NINCT$
IF NINCT$ <> "" THEN NINCT = VAL(NINCT$)
FOR I = 0 TO P*NINCZ: THETA(I,0) = TI/DTAD: NEXT I
?
?"¿Todos los valores son correctos? (s/n)
Z$ = INPUT$(1): IF Z$ = "n" OR Z$ = "N" THEN ENTRADATOS

RETURN

'XXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXX

METODONOMBRE:
SELECT CASE METODO
CASE 1: METODO$ = "Dif.Ad."
CASE 2: METODO$ = "Dif.At."
CASE 3: METODO$ = "Cr-Nic."
CASE 4: METODO$ = "Rho="+ RHO$
CASE 5: METODO$ = "Col.Or."

CASE 6: METODO$ = "EF.Lin."
CASE 7: METODO$ = "EF.2gr."
CASE 8: METODO$ = "EF.Her."
CASE 9: METODO$ = "Analit."
END SELECT
RETURN

'XXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXX

```

```

COMPARA:
'Subrutina para comparación de resultados obtenidos por dos métodos.

FOR J = 0 TO NINCTREF
  FOR I = 0 TO NINCZREF
    ERROR1(I, J) = 0
  NEXT I
NEXT J

CLS:?:?:?
?"          COMPARACION DE LOS METODOS NUMERICOS
?:?"      Método a comparar: "METODO$" ; método de referencia: "METODOREF$"
?:?"      1) Calcular error en temperatura.
?"        2) Calcular error en conversión.
?"        3) Calcular error en velocidad de generación.
?:?"      4) Parámetros estadísticos con todos los nodos.
          COMPARA$ = INPUT$(1)

          SELECT CASE COMPARA$
            CASE "1", "2", "3"
?:?"      1) Calcular error absoluto para todos los nodos.
?"        2) Calcular error porcentual para todos los nodos.

          Z$ = INPUT$(1)
          IF VAL(Z$) < 1 OR VAL(Z$) > 2 THEN GOTO COMPARA
          COMPARA$ = COMPARA$ + Z$
        END SELECT

SUMA1 = 0: SUMA2 = 0: SUMA3 = 0: SUMA4 = 0: SUMA5 = 0: SUMA6 = 0
ICOMP = 0: JCOMP = 0

FOR I = 0 TO NINCZ
  FOR I1 = 0 TO NINCZREF
    IF Z(I) = ZREF(I1) THEN
      ICOMP = ICOMP+1 'Contabiliza nodos por comparar.
    END IF
  NEXT I1
NEXT I

FOR J = 1 TO NINCT
  FOR J1 = 1 TO NINCTREF
    IF TAU(J) = TAUREF(J1) THEN
      JCOMP = JCOMP + 1 'Contabiliza incrementos de tiempo comparados.
      FOR I = 0 TO NINCZ
        FOR I1 = 0 TO NINCZREF
          IF Z(I) = ZREF(I1) THEN
            SELECT CASE COMPARA$
              CASE "11"
                ERROR1(I, J) = THETA(I, J) - THETAREF(I1, J1)
              CASE "21"
                ERROR1(I, J) = CONV(I, J) - CONVREF(I1, J1)
              CASE "31"
                ERROR1(I, J) = DTAX(I, J) - DTAXREF(I1, J1)
              CASE "12"
                ERROR1(I, J) = (THETA(I, J) - THETAREF(I1, J1))_
                  /THETAREF(I1, J1) * 100
              CASE "22"
                ERROR1(I, J) = (CONV(I, J) - CONVREF(I1, J1))_
                  /CONVREF(I1, J1) * 100
              CASE "32"
                ERROR1(I, J) = (DTAX(I, J) - DTAXREF(I1, J1))_
                  /DTAXREF(I1, J1) * 100
              CASE "4"
                SUMA1 = SUMA1 + ABS(THETA(I, J) - THETAREF(I1, J1))_
                  /THETAREF(I1, J1) * 100
            END SELECT
          END IF
        NEXT I1
      NEXT I
    END IF
  NEXT J1
NEXT J

```

```

        SUMA4 = SUMA4 + THETA (I,J) - THETAREF(I1,J1)
        IF METODOREF < 9 THEN
            SUMA2 = SUMA2 + ABS(CONV(I,J) - CONVREF(I1,J1))_
                /CONVREF(I1,J1)*100
            SUMA5 = SUMA5 + CONV(I,J) - CONVREF(I1,J1)
            SUMA3 = SUMA3 + ABS(DTAX(I,J) -DTAXREF(I1,J1))_
                /DTAXREF(I1,J1)*100
            SUMA6 = SUMA6 + DTAX(I,J) - DTAXREF(I1,J1)
        END IF
        CASE ELSE: GOTO COMPARA
    END SELECT
END IF
NEXT I1
NEXT I
END IF
NEXT J1
NEXT J

MAXERROR = 0: MINERROR = 1
FOR J = 1 TO NINCT
    S = 0
    FOR I = 0 TO NINCZ
        IF ERROR1(I,J) > MAXERROR THEN
            MAXERROR = ERROR1(I,J): IMAX = I: JMAX = J
        END IF
        IF ERROR1(I,J) < MINERROR THEN
            MINERROR = ERROR1(I,J): IMIN = I: JMIN = J
        END IF
        S = S + ERROR1(I,J)
    NEXT I
    ERRMED(J) = S/ICOMP
NEXT J

SELECT CASE COMPARA$
    CASE "11","12","21","22","31","32"
        CLS:?:?:?"          Método: "METODO$","NINCZ"x"NINCT;
        ?          "; método de referencia: "METODOREF$","NINCZREF"x"NINCTREF
        ??:
        ??:?"          Máxima desviación positiva:"MAXERROR
        ?          en el nodo "IMAX" y el paso No. "JMAX
        ??:?"          Máxima desviación negativa:"MINERROR
        ?          en el nodo "IMIN" y el paso No. "JMIN
        ??:?"          Cantidad de nodos comparados: ("ICOMP"x"JCOMP") = "ICOMP*JCOMP
        Z$ = INPUT$(1): EXIT SELECT

    CASE "4"
        CLS:?:?:?"          Método: "METODO$","NINCZ"x"NINCT;
        ?          "; método de referencia: "METODOREF$","NINCZREF"x"NINCTREF
        ??:?"          Promedio del error porcentual en valor absoluto (MAPE):
        ?          En temperatura: "SUMA1/(ICOMP*JCOMP)
        IF METODOREF < 9 THEN
            ?          En conversión: "SUMA2/(ICOMP*JCOMP)
            ?          En velocidad: "SUMA3/(ICOMP*JCOMP)
        END IF
        ??:?"          Error medio:"
        ?          En temperatura: "SUMA4/(ICOMP*JCOMP)
        IF METODOREF < 9 THEN
            ?          En conversión: "SUMA5/(ICOMP*JCOMP)
            ?          En velocidad: "SUMA6/(ICOMP*JCOMP)
        END IF

        Z$ = INPUT$(1): GOTO COMPARA

END SELECT
GOTO 53250

```

```

'XXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXX
'XXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXX

'          SUBROUTINA PARA CONTROL DE LA SALIDA DE INFORMACION

53250 IF COMPARA = 1 THEN
      COMPARA = 2
      ELSEIF COMPARA = 2 THEN
      COMPARA = 3
      END IF

53260 SCREEN 2: SCREEN 0: PRINT:PRINT

?:?:?"      (1) Tabular resultados numéricos."
?:?  "      (2) Graficar resultados."
?:?  "      (s) Menú anterior."
      Z$ = INPUT$(1)

      SELECT CASE Z$
        CASE "1": GOTO 53600
        CASE "2": GOTO 53000
        CASE "S","s": GOTO 1700
        CASE ELSE: GOTO 53000
      END SELECT

'XXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXX

53320 'SUBROUTINA PARA SALIDA DE DATOS A CADA INCREMENTO DE TIEMPO

      CLS:PRINT
      PRINT TAB(NTAU*80/(NINCT+1))"->":PRINT:PRINT
      ?"          PARAMETROS ADIMENSIONALES:
      ?:"Tiempo = "TAU(NTAU)
      ?:"Distancia";: PRINT TAB(15) "Temperatura";
                      PRINT TAB(30) "Conversión";
                      PRINT TAB(45) "dx/dt";
                      IF METODO = 8 THEN PRINT TAB(60) "dT/dZ";
      ?
      FOR I = 0 TO NINCZ
        A$ = "##.#####"
        PRINT TAB(0) USING A$; Z(I);
        PRINT TAB(15) USING A$; THETA(I,NTAU);
        PRINT TAB(30) USING A$; CONV(I,NTAU);
        PRINT TAB(45) USING A$; DTAX(I,NTAU);
        IF METODO = 8 THEN PRINT TAB(60) USING A$; THETA1(I);
        ?
      NEXT I

      GOSUB MAXMIN

      ?:"máximos:";: PRINT TAB(15) USING A$; MAXTHETA;
                      PRINT TAB(30) USING A$; MAXCONV;
                      PRINT TAB(45) USING A$; MAXDTAX
      ?:"mínimos:";: PRINT TAB(15) USING A$; MINTHETA;
                      PRINT TAB(45) USING A$; MINDTAX

      NTAU = NTAU + 1
      TAU(NTAU) = NTAU * DTAT

RETURN

```

```

'XXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXX

    $INCLUDE "GAUSS.BAS"
    $INCLUDE "RKUTTA.POL"
    $INCLUDE "SALIDATA.POL"

'XXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXX

MAXMIN:
    IF METODO = 5 AND COMPARA = 0 THEN N = 1 ELSE N = 0
    FOR I = N TO NINCZ
        IF THETA(I,NTAU) > MAXTHETA THEN MAXTHETA = THETA(I,NTAU)
        IF THETA(I,NTAU) < MINTHETA THEN MINTHETA = THETA(I,NTAU)
        IF CONV(I,NTAU) > MAXCONV THEN MAXCONV = CONV(I,NTAU)
        IF DTAX(I,NTAU) > MAXDTAX THEN MAXDTAX = DTAX(I,NTAU)
        IF DTAX(I,NTAU) < MINDTAX THEN MINDTAX = DTAX(I,NTAU)
    NEXT I
RETURN

'XXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXX

```

Anexo IV

Programas Complementarios

Los siguientes programa fueron escritos para correr en Turbo Basic[®] y son necesarios para que funcione el POLICOMP.BAS presentado en el Anexo III.

Eliminación Gaussiana: GAUSS.BAS

```
'          SUBROUTINA PARA SOLUCION DE ECUACIONES LINEALES SIMULTANEAS
'
'                      Copyright 1989 by:
'
'                      Juan Jorge Hermosillo Villalobos

SBGAUSS:
'          Comienza eliminación gaussiana con pivoteo parcial.

51270 FOR Q = 1 TO N-1
'          Ejecuta pivoteo parcial en cada iteración Q.
          DMAX = ABS(DA(Q,Q)): R = Q
          FOR I = Q TO N
              IF ABS(DA(I,Q)) > DMAX THEN DMAX = ABS(DA(I,Q)): R = I
          NEXT I
          IF R <> Q THEN
              FOR J = 1 TO N
                  DAA = DA(Q,J): DA(Q,J) = DA(R,J): DA(R,J) = DAA
              NEXT J
              DBB = DB(Q): DB(Q) = DB(R): DB(R) = DBB
          END IF
          FOR K = Q TO N
              DFACT = DA(K+1,Q)/DA(Q,Q)
              FOR J = Q TO N
                  DA(K+1,J) = DA(K+1,J) - DFACT*DA(Q,J)
              NEXT J
              DB(K+1) = DB(K+1) - DFACT*DB(Q)
          NEXT K
      NEXT Q
'
'                      Aquí termina la eliminación gaussiana
'                      Comienza substitución hacia atrás

      IF DA(N,N) = 0 THEN 51490
      DX(N) = DB(N)/DA(N,N)
      FOR I=N-1 TO 1 STEP -1
          DS=0
          FOR K = I+1 TO N
              DS = DS + DA(I,K)*DX(K)
          NEXT K
          DX(I) = (DB(I)-DS)/DA(I,I)
      NEXT I
      FOR I=1 TO N: FOR J=1 TO N: DA(I,J) = 0: NEXT: NEXT
RETURN

51490 CLS:PRINT:PRINT:PRINT"Sugiero revisar la formulación del programa...":END
```

Solución de Ecuaciones Ordinarias por el Método de Runge-Kutta de Cuarto Orden con Extrapolación de Richardson: RKUTTA.POL

```

'          SUBROUTINA PARA LA EJECUCION DEL METODO DE RUNGE-KUTTA
'          EN EL PROGRAMA DE SIMULACION DE UNA
'          POLIMERIZACION ESTATICA

'          Copyright 1989 by:

'          Juan Jorge Hermosillo Villalobos

PRERKUTA:
  IF METODO = 5 THEN N = 1 ELSE N = 0
  FOR I = N TO P*NINCZ
    X1 = TAU(NTAU): X2 = TAU(NTAU) + DTAT: NP = 1
    W = CONV(I,NTAU)
    GOSUB 52000
    DTAX(I,NTAU) = W - CONV(I,NTAU)
    CONV(I,NTAU+1) = W
  NEXT I
RETURN

52000 '          SUBROUTINA PARA LA SOLUCION DE UNA ECUACION DIFERENCIAL
'          ORDINARIA POR EL METODO DE RUNGE-KUTTA

      K0 = 0: H = (X2 - X1)/NP: H2 = H/2: Z = W

52380 X = X1 + K0 * H: Y = W
      GOSUB 52820
      K1 = F: Y = W + H/2 * F: X = X + H/2
      GOSUB 52820
      K2 = F: Y = W + H/2 * F
      GOSUB 52820
      K3 = F: Y = W + H * F: X = X + H/2
      GOSUB 52820
      K4 = F: W = W + H/6 * (K1 + 2 * K2 + 2 * K3 + K4)

      'Nueva ejecución del Runge-Kutta, con paso igual a la mitad del estipulado,
      para la extrapolación de Richardson
      FOR J = 1 TO 2
        X = X1 + K0 * H + (J - 1) * H2: Y = Z
        GOSUB 52820
        K1 = F: Y = Z + H2/2 * F: X = X + H2/2
        GOSUB 52820
        K2 = F: Y = Z + H2/2 * F
        GOSUB 52820
        K3 = F: Y = Z + H2 * F: X = X + H2/2
        GOSUB 52820
        K4 = F: Z = Z + H2/6 * (K1 + 2*K2 + 2*K3 + K4)
      NEXT J

      'Extrapolación de Richardson.
      W = (W - Z*(H/H2)^4) / (1 - (H/H2)^4)
      K0 = K0 + 1 'K0 es el número de paso en que se ha hecho la aproximación.
      IF X1 + K0*H >= X2 THEN RETURN ELSE 52380

52820 IF CASORARO = 1 THEN
      F = DA * EXP(GAMMA*(1-1/THETA(0,0))) '(solución analítica)
    ELSE
      F = DA * EXP(GAMMA*(1-1/THETA(I,NTAU))) * (1 - Y)^ORD
    END IF
RETURN

```

Subrutina para Producir Resultados Gráficos: SALIDATA.POL

Este programa complementa al POLICOMP.BAS en su capacidad de presentación de resultados, tanto en su versión de tabulación numérica como en una variedad de presentaciones gráficas en dos y tres dimensiones para facilitar la visualización y la interpretación de los resultados.

53000

```
'          SUBROUTINA PARA GRAFICAR RESULTADOS
'          EN EL PROGRAMA DE SIMULACION DE UNA
'          POLIMERIZACION ESTATICA
'
'          Copyright 1989 by:
'
'          Juan Jorge Hermosillo Villalobos

SCREEN 2: SCREEN 0: CLS: ???
?"      ¿Cómo se desea graficar los resultados?"
?:"      (2) En dos dimensiones.
?"      (3) En tres dimensiones.
?::?"    (m) Modificar presentación gráfica.
?:"      (s) Menú anterior.

GRAFICA$ = INPUT$(1)

SELECT CASE GRAFICA$

CASE "2"
?:"      GRAFICAS EN 2 DIMENSIONES.
?:"      (1) Temperatura vs. distancia.
?"      (2) Conversión vs. distancia.
?"      (3) Temperatura y conversión vs. distancia.
?"      (4) Temperatura vs. tiempo.
?"      (5) Conversión vs. tiempo.
?"      IF COMPARA = 3 THEN
?"      (6) Error vs. distancia.
?"      (7) Error vs. tiempo.
?"      (8) Error medio vs. tiempo.
?"      END IF
Z$ = INPUT$(1): NTAU = 0
GRAFICA$ = GRAFICA$ + Z$: GRAFICA = VAL(GRAFICA$)
IF GRAFICA < 21 OR GRAFICA > 28 THEN 53000
GOSUB 54120

CASE "3"
?:"      GRAFICAS EN 3 DIMENSIONES.
?:"      (1) Temperatura vs. distancia y tiempo.
?"      (2) Conversión vs. distancia y tiempo.
?"      (3) Velocidad de reacción vs. distancia y tiempo.
?"      IF COMPARA = 3 THEN
?"      (4) Error vs. distancia y tiempo.
?"      END IF
Z$ = INPUT$(1): NTAU = 0
GRAFICA$ = GRAFICA$ + Z$: GRAFICA = VAL(GRAFICA$)
IF GRAFICA < 31 OR GRAFICA > 34 THEN 53000
GOSUB 54520

CASE "m", "M": GOSUB 55000: GOTO 53000
CASE "s", "S": GOTO 53260
CASE ELSE: GOTO 53000
```

```

END SELECT
GOTO 53000

```

53600 ' SUBROUTINA PARA IMPRIMIR RESULTADOS NUMERICOS

```

CLS:??
?      "      ¿Qué resultados numéricos se desean?
?
?      "      Temperatura, conversión y velocidad de reacción:"
?:?    "      (1) en función del tiempo en cierto nodo."
?:?    "      (2) en cierto tiempo para todos los nodos."
      IF COMPARA = 3 THEN
?:?:?  "      El error calculado:
?:?    "      (3) en función del tiempo en cierto nodo."
?:?    "      (4) en cierto tiempo para todos los nodos."
      END IF

Z$ = INPUT$(1)
SELECT CASE Z$
CASE "1"
53690  ? :INPUT"      ¿En qué nodo se desean los resultados";I
      IF I > NINCZ*P THEN 53690
      FOR K=1 TO NINCT/20+1
        CLS: ?"      NODO "I
        ? :? TAB(15)"Tiempo";: ? TAB(30)"Temperatura";: ? TAB(45)"Conversión";: ?
TAB(60)"Velocidad"
        FOR J=(K-1)*20 TO K*20
          ? J;: ? TAB(15) USING A$; TAU(J);: ? TAB(30) USING A$; THETA(I,J);: ?
TAB(45) USING A$; CONV(I,J);: ? TAB(60) USING A$; DTAX(I,J)
        NEXT J
        Z$=INPUT$(1)
      NEXT K
      GOTO 53260
CASE "2"
      ? :INPUT"      ¿En qué número de incremento de tiempo se desean los
resultados?";J
53800  IF J > NINCT THEN 53800
      CLS: ?"      TIEMPO = "TAU(J)" (incremento #"J")"
      ? :?"Nodo";: ? TAB(15)"Distancia";: ? TAB(30)"Temperatura";: ?
TAB(45)"Conversión";: ? TAB(60)"Velocidad"
      FOR I = 0 TO NINCZ*P
        ? I;: ? TAB(15) USING A$; Z(I);: ? TAB(30) USING A$; THETA(I,J);: ?
TAB(45) USING A$; CONV(I,J);: ? TAB(60) USING A$; DTAX(I,J)
      NEXT I
      Z$=INPUT$(1): GOTO 53260
CASE "3"
53700  ? :INPUT"      ¿En qué nodo se desean los resultados";I
      IF I > NINCZ*P THEN 53700
      FOR K=1 TO NINCT/20+1
        CLS: ?"      NODO "I
        ? :? TAB(15) "Tiempo";: ? TAB(30)"Error";: ? TAB(45)"Error medio"
        FOR J=(K-1)*20 TO K*20
          ? J;: ? TAB(15) USING A$; TAU(J);: ? TAB(30) USING A$; ERROR1(I,J);: ?
TAB(45) USING A$; ERRMED(J)
        NEXT J
        Z$ = INPUT$(1)
      NEXT K
      GOTO 53260
CASE "4"
53810  ? :INPUT"      ¿En qué número de incremento de tiempo se desean los
resultados?";J
      IF J > NINCT THEN 53810
      CLS: ?"      TIEMPO = "TAU(J)" (incremento #"J")"
      ? :?"Nodo";: ? TAB(15)"Distancia";: ? TAB(30)"Error";: ? TAB(45)"Error medio"

```

```

        FOR I = 0 TO NINCZ*P
          ? I;: ? TAB(15) USING A$; Z(I);: ? TAB(30) USING A$; ERROR1(I,J);: ?
TAB(45) USING A$; ERRMED(J)
        NEXT I
        Z$=INPUT$(1): GOTO 53260
      CASE ELSE: GOTO 53600
    END SELECT

```

54000 ' SUBROUTINA PARA GRAFICAR RESULTADOS (2D)

```

54120 GOSUB 54300
FOR J = 0 TO NINCT
  FOR I = 0 TO NINCZ*P
    SELECT CASE GRAFICA$
      CASE "21","22","23","24","25"
        Y3(I) = Y1(I): Y4(I) = Y2(I)
        Y1(I) = (THETA(I,J) - MINTHETA)/(MAXTHETA - MINTHETA)
        Y2(I) = CONV(I,J)/(MAXCONV - MINCONV)
      CASE "26","27"
        Y3(I) = Y1(I)
        Y1(I) = (ERROR1(I,J) - MINERROR)/(MAXERROR - MINERROR)
      CASE "28"
        Y3(I) = Y1(I)
        Y1(I) = (ERRMED(J) - MINERROR)/(MAXERROR - MINERROR)
    END SELECT
  NEXT I
  FOR I = 0 TO NINCZ*P-1
    SELECT CASE GRAFICA$
      CASE "21"
        IF J>0 THEN IF ACUMULADA$ = "n" OR ACUMULADA$ = "N" THEN_
          LINE (XG(I),Y3(I))-(XG(I+1),Y3(I+1)),COLFOND
          LINE (XG(I),Y1(I))-(XG(I+1),Y1(I+1)),COLFIG1 'graf. temp.
        CASE "22"
          IF J>0 THEN IF ACUMULADA$ = "n" OR ACUMULADA$ = "N" THEN_
            LINE (XG(I),Y4(I))-(XG(I+1),Y4(I+1)),COLFOND
            LINE (XG(I),Y2(I))-(XG(I+1),Y2(I+1)),COLFIG2 'graf. conv.
          CASE "23"
            IF J>0 THEN IF ACUMULADA$ = "n" OR ACUMULADA$ = "N" THEN_
              LINE (XG(I),Y3(I))-(XG(I+1),Y3(I+1)),COLFOND
              LINE (XG(I),Y1(I))-(XG(I+1),Y1(I+1)),COLFIG1 'graf. temp.
            IF J>0 THEN IF ACUMULADA$ = "n" OR ACUMULADA$ = "N" THEN_
              LINE (XG(I),Y4(I))-(XG(I+1),Y4(I+1)),COLFOND
              LINE (XG(I),Y2(I))-(XG(I+1),Y2(I+1)),COLFIG2 'graf. conv.
            CASE "26"
              IF J>0 THEN IF ACUMULADA$ = "n" OR ACUMULADA$ = "N" THEN_
                LINE (XG(I),Y3(I))-(XG(I+1),Y3(I+1)),COLFOND
                LINE (XG(I),Y1(I))-(XG(I+1),Y1(I+1)),COLFIG4 'graf. error.
            CASE ELSE: END SELECT
          IF GRAF$ = "DOBLE" THEN 54235 ELSE 54240
        54235 SELECT CASE GRAFICA$
          CASE "21"
            IF J>0 THEN IF ACUMULADA$ = "n" OR ACUMULADA$ = "N" THEN_
              LINE (XGI(I),Y3(I))-(XGI(I+1),Y3(I+1)),COLFOND
              LINE (XGI(I),Y1(I))-(XGI(I+1),Y1(I+1)),COLFIG1 'graf. temp.
            CASE "22"
              IF J>0 THEN IF ACUMULADA$ = "n" OR ACUMULADA$ = "N" THEN_
                LINE (XGI(I),Y4(I))-(XGI(I+1),Y4(I+1)),COLFOND
                LINE (XGI(I),Y2(I))-(XGI(I+1),Y2(I+1)),COLFIG2 'graf. conv.
            CASE "23"
              IF J>0 THEN IF ACUMULADA$ = "n" OR ACUMULADA$ = "N" THEN_
                LINE (XGI(I),Y3(I))-(XGI(I+1),Y3(I+1)),COLFOND
                LINE (XGI(I),Y1(I))-(XGI(I+1),Y1(I+1)),COLFIG1 'graf. temp.
              IF J>0 THEN IF ACUMULADA$ = "n" OR ACUMULADA$ = "N" THEN_
                LINE (XGI(I),Y4(I))-(XGI(I+1),Y4(I+1)),COLFOND

```

```

        LINE (XGI(I),Y2(I))-(XGI(I+1),Y2(I+1)),COLFIG2 'graf. conv.
CASE "26"
    IF J>0 THEN IF ACUMULADA$ = "n" OR ACUMULADA$ = "N" THEN_
        LINE (XGI(I),Y3(I))-(XGI(I+1),Y3(I+1)),COLFOND
        LINE (XGI(I),Y1(I))-(XGI(I+1),Y1(I+1)),COLFIG4 'graf. error
CASE ELSE: END SELECT

54240      SELECT CASE GRAFICA$
        CASE "24"
            IF J>0 THEN LINE (XG(J-1),Y3(I))-(XG(J),Y1(I)), COLFIG1
'graf.temp.
            IF J>0 THEN IF I=NINCZ*P-1 THEN LINE (XG(J-1),Y3(NINCZ*P))-
(XG(J),Y1(NINCZ*P)), COLFIG1
        CASE "25"
            IF J>0 THEN LINE (XG(J-1),Y4(I))-(XG(J),Y2(I)), COLFIG2
'graf.conv.
            IF J>0 THEN IF I=NINCZ*P-1 THEN LINE (XG(J-1),Y4(NINCZ*P))-
(XG(J),Y2(NINCZ*P)), COLFIG2
        CASE "27"
            IF J>0 THEN LINE (XG(J-1),Y3(I))-(XG(J),Y1(I)), COLFIG4 'graf.
error
            IF J>0 THEN IF I=NINCZ*P-1 THEN LINE (XG(J-1),Y3(NINCZ*P))-
(XG(J),Y1(NINCZ*P)), COLFIG4
        CASE "28"
            IF J>0 THEN LINE (XG(J-1),Y3(I))-(XG(J),Y1(I)), COLFIG 'graf.error
medio
            IF J>0 THEN IF I=NINCZ*P-1 THEN LINE (XG(J-1),Y3(NINCZ*P))-
(XG(J),Y1(NINCZ*P)), COLFIG
        END SELECT

        NEXT I
        LOCATE 15,64: PRINT"
        LOCATE 15,64: PRINT USING "##.#####"; TAU(J)
        NINCT2=0
        DELAY SEGUNDOS
    NEXT J

    SELECT CASE GRAFICA$
        CASE "21","24"
            IF GRAFPARED$ = "S" OR GRAFPARED$ = "s" THEN
                K = (TW/DTAD-MINTHETA)/(MAXTHETA-MINTHETA)
                LINE (0,K)-(1,K), COLFIG
                COLOR COLFIG1: LOCATE (1-K)*20,52: ?"Tw"
            END IF
        CASE "26","27"
            K = -MINERROR/(MAXERROR-MINERROR)
            LINE (0,K)-(1,K),COLFIG
            COLOR COLFIG4: LOCATE 1+(1-K)*20,52: ?"0.00"
    END SELECT

    Z$ = INPUT$(1)

    SELECT CASE Z$
        CASE "1","2","3","4","5","6","7","8": MARCO = 1: GRAFICA$ = "2"+Z$: GOTO
54120
        CASE ELSE: MARCO = 0: RETURN
    END SELECT

54300 IF MARCO = 1 THEN 54320
    SCREEN 9: COLOR COLFIG,COLFOND
    VIEW (1,1)-(395,281),COLFOND,COLFIG: WINDOW (0,0)-(1,1)
54320 SELECT CASE GRAFICA$
        CASE "21","22","23","26"
            IF GRAF$ = "DOBLE" THEN 54350

```

```

        FOR I = 0 TO NINCZ*P: XG(I) = Z(I): NEXT I
        FOR I = 0 TO NINCZ*P: PSET(Z(I),0.01),COLFIG: PSET (Z(I),0.005),COLFIG:
NEXT I: GOTO 54360
54350   FOR I = 0 TO NINCZ*P: XG(I) = 0.5+Z(I)/2: XGI(I) = 0.5-Z(I)/2: NEXT I
        FOR I = 0 TO NINCZ*P: PSET(Z(I)+0.5,0.005),COLFIG: PSET(0.5-
Z(I),0.005),COLFIG: NEXT I: GOTO 54360
        CASE "24","25","27"
            FOR I=0 TO NINCT: XG(I) = TAU(I)/TAU(NINCT): NEXT I
        END SELECT

54360 SELECT CASE GRAFICA$
    CASE "21","24"
        LOCATE 4,52: COLOR COLFIG1: ?"Temperatura"
        LOCATE 1,52: ? USING "#.###";MAXTHETA
        LOCATE 20,52: ? USING "#.###";MINTHETA
    CASE "22","25"
        LOCATE 6,52: COLOR COLFIG2: ?"Conversión"
        LOCATE 1,52: ? USING "#.###";MAXCONV
        LOCATE 20,52: ? USING "#.###";MINCONV
    CASE "23"
        LOCATE 4,52: COLOR COLFIG1: ?"Temperatura"
        LOCATE 1,52: ? USING "#.###";MAXTHETA
        LOCATE 20,52: ? USING "#.###";MINTHETA
        LOCATE 6,52: COLOR COLFIG2: ?"Conversión"
        LOCATE 2,52: ? USING "#.###";MAXCONV
        LOCATE 19,52: ? USING "#.###";MINCONV
    CASE "26","27"
        LOCATE 8,52: COLOR COLFIG4: ?"Error"

        LOCATE 1,52: ? USING "+#.##";MAXERROR
        LOCATE 20,52: ? USING "+#.##";MINERROR
    CASE "28": LOCATE 10,52: COLOR COLFIG: ?"Error medio": LINE (0,(-
MINERROR/(MAXERROR-MINERROR)*.95))-(1,(-MINERROR/(MAXERROR-MINERROR)*.95)),COLFIG
    END SELECT

    COLOR COLFIG: LOCATE 15,54: PRINT"Tiempo = "
    LOCATE 15,64: ? TAU(0)
    LOCATE 1,62: ? METODO$, "NINCZ"x"NINCT
    IF GRAFICA$ = "26" OR GRAFICA$ = "27" THEN
        LOCATE 2,62: ?"vs "METODOREF$", "NINCZREF"x"NINCTREF
    END IF
    LOCATE 12,54: PRINT"Biot = "BIOT
    LOCATE 22,1
    SELECT CASE GRAFICA$
        CASE "21","22","23","26"
            ?"0" distancia 1"
            IF GRAF$ = "DOBLE" THEN LOCATE 22,1: ?"-1 distancia
1"
        CASE "24","25","27","28"
            ?"0 tiempo " ;: ? USING
"#.###";TAU(NINCT)
    END SELECT
    RETURN

```

54520 ' SUBROUTINA PARA GRAFICAR vs. DISTANCIA Y TIEMPO (3D)

```

54550 GOSUB 54780
    IF ESTEREO$ = "s" THEN
        A1 = COLFIG1: A2 = COLFIG2: A3 = COLFIG3: A4 = COLFIG4
        COLFIG1 = 4: COLFIG2 = 4: COLFIG3 = 4: COLFIG4 = 4: GOSUB GRAF3
        B = XFACT : XFACT = XFACT + 30
    
```

```

        C = YFACT : YFACT = YFACT + 2
        COLFIG1 = 1: COLFIG2 = 1: COLFIG3 = 1: COLFIG4 = 1: GOSUB GRAF3
        COLFIG1 = A1: COLFIG2 = A2: COLFIG3 = A3: COLFIG4 = A4
        XFACT = B: YFACT = C
    ELSE
        GOSUB GRAF3
    END IF
    RETURN

GRAF3:

54560 FOR J=NINCT TO 1 STEP -1
54570     FOR I = 0 TO NINCZ*P
            IF GRAF$ = "" THEN 54590 ELSE IF GRAF$ = "IZQ" THEN 54595
54580         XG(I) = Z(I)*128+128 + J*XFACT/NINCT: XGI(I) = 128-Z(I)*128 +
J*XFACT/NINCT
            XG2(I) = Z(I)*128+128 + (J-1)*XFACT/NINCT: XG2I(I) = 128-Z(I)*128 +
(J-1)*XFACT/NINCT: GOTO 54600
54590         XG(I) = Z(I)*256 + J*XFACT/NINCT
            XG2(I) = Z(I)*256 + (J-1)*XFACT/NINCT: GOTO 54600
54595         XGI(I) = 256 - Z(I)*256 + J*XFACT/NINCT
            XG2I(I) = 256 - Z(I)*256 + (J-1)*XFACT/NINCT: GOTO 54600
54600         SELECT CASE GRAFICA$
            CASE "31"
                Y1(I) = 182 - (THETA(I,J)-MINTHETA)/(MAXTHETA-MINTHETA)*182 -
J*YFACT/NINCT + YFACT
                Y2(I) = 182 - (THETA(I,J-1)-MINTHETA)/(MAXTHETA-MINTHETA)*182 -
(J-1)*YFACT/NINCT + YFACT
                KOLOR = COLFIG1
            CASE "32"
                Y1(I) = 182 - CONV(I,J)/(MAXCONV-MINCONV)*182 - J*YFACT/NINCT +
YFACT
                Y2(I) = 182 - CONV(I,J-1)/(MAXCONV-MINCONV)*182 - (J-
1)*YFACT/NINCT + YFACT
                KOLOR = COLFIG2
            CASE "33"
                Y1(I) = 182 - (DTAX(I,J)-MINDTAX)/(MAXDTAX-MINDTAX)*182 -
J*YFACT/NINCT + YFACT
                Y2(I) = 182 - (DTAX(I,J-1)-MINDTAX)/(MAXDTAX-MINDTAX)*182 - (J-
1)*YFACT/NINCT+YFACT
                KOLOR = COLFIG3
            CASE "34"
                Y1(I) = 182 - (ERROR1(I,J)-MINERROR)/(MAXERROR-MINERROR)*182 -
J*YFACT/NINCT + YFACT
                Y2(I) = 182 - (ERROR1(I,J-1)-MINERROR)/(MAXERROR-MINERROR)*182 -
(J-1)*YFACT/NINCT + YFACT
                KOLOR = COLFIG4
            END SELECT

54650     NEXT I
            IF GRAF$ = "" THEN 54700
54660     FOR I = NINCZ*P TO 1 STEP -1
            IF ISOBANDAS$ = "s" OR ISOBANDAS$ = "S" THEN GOSUB ISOBANDAS
            IF ISOBANDAS$ = "alta" THEN Z = 1: GOSUB ISOALTA
            IF ISOBANDAS$ = "alta" THEN 54670
            IF OPACIDAD > 0 THEN
                FOR K=1 TO OPACIDAD
                    LINE(XGI(I-1)+K/OPACIDAD*(XG2I(I-1)-XGI(I-1)),Y1(I-
1)+K/OPACIDAD*(Y2(I-1)-Y1(I-1)))-(XGI(I)+K/OPACIDAD*(XG2I(I)-
XGI(I)),Y1(I)+K/OPACIDAD*(Y2(I)-Y1(I))),KOLOR2
                NEXT K
            END IF
54670     LINE(XGI(I-1),Y1(I-1))-(XGI(I),Y1(I)),KOLOR: LINE -
(XG2I(I),Y2(I)),KOLOR: LINE -(XG2I(I-1),Y2(I-1)),KOLOR: LINE -(XGI(I-1),Y1(I-
1)),KOLOR

```

```

NEXT I: IF GRAF$ = "IZQ" THEN 54730
54700 FOR I = 1 TO NINCZ*P
      IF ISOBANDAS$ = "s" OR ISOBANDAS$ = "S" THEN GOSUB ISOBANDAS
      IF ISOBANDAS$ = "alta" THEN Z = 2: GOSUB ISOALTA
      IF ISOBANDAS$ = "alta" THEN 54710
      IF OPACIDAD > 0 THEN
        FOR K=1 TO OPACIDAD
          LINE(XG(I-1)+K/OPACIDAD*(XG2(I-1)-XG(I-1)),Y1(I-
1)+K/OPACIDAD*(Y2(I-1)-Y1(I-1)))-(XG(I)+K/OPACIDAD*(XG2(I)-
XG(I)),Y1(I)+K/OPACIDAD*(Y2(I)-Y1(I))),KOLOR2
        NEXT K
      END IF
54710 LINE(XG(I-1),Y1(I-1))-(XG(I),Y1(I)),KOLOR: LINE -
(XG2(I),Y2(I)),KOLOR: LINE -(XG2(I-1),Y2(I-1)),KOLOR: LINE -(XG(I-1),Y1(I-1)),KOLOR
NEXT I
54730 IF TAU(J-1) = 0 THEN LINE(XG2(NINCZ*P),Y2(NINCZ*P))-(256,YFACT+183),COLFIG
54760 NEXT J

```

```

SELECT CASE GRAFICA$
CASE "31"
  IF GRAFPARED$ = "S" OR GRAFPARED$ = "s" THEN
    K = (TW/DTAD-MINTHETA)/(MAXTHETA-MINTHETA)
    LINE (256,182+YFACT)-(256,182-K*182+YFACT),COLFIG
    LINE -(256+XFACT,182-K*182),COLFIG
    COLOR COLFIG1: LOCATE 13*(1-K),(XFACT+256)/8+2: ?"Tw"
  END IF
CASE "34"
  K = -MINERROR/(MAXERROR-MINERROR)
  LINE (256,182-K*182+YFACT)-(256+XFACT,182-K*182),COLFIG
  COLOR COLFIG4: LOCATE 1+13*(1-K),(XFACT+256)/8+2: ?"0.00"
END SELECT

```

```

Z$ = INPUT$(1)
RETURN

```

```

ISOBANDAS:
  YPROM = (Y1(I)+Y2(I)+Y1(I-1)+Y2(I-1))/4
  K = OPACIDAD/2
ISOBANDAS1:
  SELECT CASE GRAFICA$
    CASE "31": PARAMETRO = (MAXTHETA-MINTHETA)/182*(-YPROM + 182 -
(J*(OPACIDAD-K)/OPACIDAD + (J-1)*K/OPACIDAD)*YFACT/NINCT + YFACT) + MINTHETA:
PARAMETRO = 14*(PARAMETRO-MINTHETA)/(MAXTHETA-MINTHETA)
    CASE "32": PARAMETRO = MAXCONV/182*(-YPROM + 182 - (J*(OPACIDAD-
K)/OPACIDAD + (J-1)*K/OPACIDAD)*YFACT/NINCT + YFACT): PARAMETRO =
14*PARAMETRO/MAXCONV
    CASE "33": PARAMETRO = (MAXDTAX -MINDTAX)/182*(-YPROM +182 -
(J*(OPACIDAD-K)/OPACIDAD + (J-1)*K/OPACIDAD)*YFACT/NINCT + YFACT) + MINDTAX:
PARAMETRO = 14*(PARAMETRO-MINDTAX)/(MAXDTAX-MINDTAX)
    CASE "34": PARAMETRO = (MAXERROR-MINERROR)/182*(-YPROM +182 -
(J*(OPACIDAD-K)/OPACIDAD + (J-1)*K/OPACIDAD)*YFACT/NINCT + YFACT) + MINERROR:
PARAMETRO = 14*(PARAMETRO-MINERROR)/(MAXERROR-MINERROR)
  END SELECT
  KOLOR2 = COL(INT(PARAMETRO*BANDAS/14))
RETURN

```

```

ISOALTA:
  FOR K = 1 TO OPACIDAD      'para interpolar en tiempo
    FOR L = 1 TO OPACIDAD    'para interpolar en el espacio
      IF Z=1 THEN XPROM = XGI(I-1) + K/OPACIDAD*(XG2I(I-1) - XGI(I-1)) +
L/OPACIDAD*((XGI(I) + K/OPACIDAD*(XG2I(I) - XGI(I))) - (XGI(I-1) +
K/OPACIDAD*(XG2I(I-1) - XGI(I-1))))
      IF Z=2 THEN XPROM = XG(I-1) + K/OPACIDAD*(XG2(I-1) - XG(I-1)) +
L/OPACIDAD*((XG(I) + K/OPACIDAD*(XG2(I) - XG(I))) - (XG(I-1) + K/OPACIDAD*(XG2(I-1)
- XG(I-1))))

```

```

        YPROM = Y1(I-1) + K/OPACIDAD*( Y2(I-1) - Y1(I-1)) +
L/OPACIDAD*((Y1(I) + K/OPACIDAD*( Y2(I) - Y1(I))) - (Y1(I-1) + K/OPACIDAD*( Y2(I-1)
- Y1(I-1))))
        GOSUB ISOBANDAS1
        PSET(XPROM, YPROM), KOLOR2
    NEXT L
NEXT K
RETURN

```

```

54780 SCREEN 9: COLOR COLFIG, COLFOND
IF TI>=TW THEN TM = TW ELSE TM = TI
IF ESTEREO$ = "s" THEN
    A = COLFIG: COLFIG = 4: GOSUB MARCO3
    B = XFACT: COLFIG = 1: XFACT = XFACT + 30
    C = YFACT: YFACT = YFACT + 2: GOSUB MARCO3
    COLFIG = A: XFACT = B: YFACT = C
ELSE
    GOSUB MARCO3
END IF
RETURN

```

MARCO3:

```

    LINE(0, YFACT)-(0, 183+YFACT), COLFIG: LINE-(256, 183+YFACT), COLFIG: LINE -
(256+XFACT, 183), COLFIG: LINE -(256+XFACT, 0), COLFIG: LINE -(XFACT, 0), COLFIG: LINE -
(0, YFACT), COLFIG
    LINE(0, 183+YFACT)-(XFACT, 183), COLFIG: LINE-(256+XFACT, 183), COLFIG: LINE
(XFACT, 183)-(XFACT, 0), COLFIG

    LOCATE 1, 1: ?METODO$, "NINCZ"x"NINCT";
    IF GRAFICA$ = "34" THEN
        ?"vs"
        LOCATE 2, 1: ?METODOREF$, "NINCZREF"x"NINCTREF"
    END IF
    IF GRAF$ = "DOBLE" THEN 54950
    FOR I=0 TO NINCZ*P: PSET
(Z(I)*256, YFACT+184), COLFIG: PSET(Z(I)*256, YFACT+185), COLFIG: NEXT: LOCATE
(183+YFACT)/14+2, 1
        IF GRAF$ = "" THEN PRINT"0          distancia          1": GOTO 54960
        IF GRAF$ = "IZQ" THEN PRINT"-1          distancia          0": GOTO 54960
54950 FOR I=0 TO NINCZ*P: PSET (128+Z(I)*128, YFACT+184), COLFIG: PSET (128-
Z(I)*128, YFACT+184), COLFIG: PSET (128+Z(I)*128, YFACT+185), COLFIG: PSET (128-
Z(I)*128, YFACT+185), COLFIG: NEXT:
        LOCATE (183+YFACT)/14+2, 1: PRINT"-1          distancia          1

54960 LOCATE (379+YFACT)/28, (544+XFACT)/16: ?"tiempo"
    LOCATE (183+YFACT)/14, 35: ?"0.00"
    LOCATE 14, (XFACT+256)/8+1: ? USING "#.##"; TAU(NINCT)
    LOCATE YFACT/14+1, 1
    SELECT CASE GRAFICA$
        CASE "31"
            COLOR COLFIG1: ?"Temp"
            LOCATE 1, (XFACT+256)/8+2: ? USING "#.##"; MAXTHETA
            LOCATE 13, (XFACT+256)/8+2: ? USING "#.##"; MINTHETA

        CASE "32"
            COLOR COLFIG2: ?"Conv"
            LOCATE 1, (XFACT+256)/8+2: ? USING "#.##"; MAXCONV
            LOCATE 13, (XFACT+256)/8+2: ? USING "#.##"; MINCONV

        CASE "33"
            COLOR COLFIG3: ?"Vel"
            LOCATE 1, (XFACT+256)/8+2: ? USING "#.##"; MAXDTAX
            LOCATE 13, (XFACT+256)/8+2: ? USING "#.##"; MINDTAX

        CASE "34"

```

```

K = -MINERROR/(MAXERROR-MINERROR)
LINE (0,182-K*182+YFACT)-(XFACT,182-K*182),COLFIG
LINE -(256+XFACT,182-K*182),COLFIG
COLOR COLFIG4: ?"Error"
LOCATE 1,(XFACT+256)/8+2: ? USING "+##.##"; MAXERROR
LOCATE 13,(XFACT+256)/8+2: ? USING "+##.##"; MINERROR
END SELECT
RETURN

```

' SUBROUTINA PARA MODIFICAR PRESENTACION GRAFICA

55000 SCREEN 2: SCREEN 0

```

?:"?" MODIFICACION DE PRESENTACION GRAFICA
?:"" Para cualquier gráfica:
?" 1) Modificar los colores de las gráficas.
?" 2) Mostrar todo el espesor o sólo la mitad.
?" 3) Modificar factor de escala vertical.
?" 4) Mostrar (o no) temperatura de la pared.
?:"" Para las gráficas en 2D:
?" 5) Modificar velocidad de graficación.
?" 6) Mostrar (o no) gráficas acumuladas en el tiempo.
?:"" Para las gráficas en 3D:
?" 7) Modificar los factores de vista.
?" 8) Modificar la opacidad/Colorear isobandas.
?" 9) Mostrar gráficas estereoscópicas.
?:"" s) Menú anterior.
Z$ = INPUT$(1)

SELECT CASE Z$

CASE "1"
CLS: SCREEN 9
?:"" ¿De qué colores se desean las gráficas?"
?:"" Colores a escoger:
FOR I=0 TO 15: LINE (40*I,70)-(40*(I+1),95),I,BF: NEXT I
FOR I=0 TO 15: LOCATE 8,5*I+1: PRINT I: NEXT I
?:"" Color del fondo (0 - 7; actual="COLFOND");:INPUT
COLFOND$: IF COLFOND$<>" " THEN COLFOND=VAL(COLFOND$)
?" Color de los ejes y letreros (0-15;
actual="COLFIG");:INPUT COLFIG$:IF COLFIG$<>" " THEN COLFIG=VAL(COLFIG$)
?" Color para temperatura (0-15; actual="COLFIG1");:INPUT
COLFIG1$: IF COLFIG1$<>" " THEN COLFIG1=VAL(COLFIG1$)
?" Color para conversiøn (0-15; actual="COLFIG2");: INPUT
COLFIG2$: IF COLFIG2$<>" " THEN COLFIG2=VAL(COLFIG2$)
?" Color para velocidad (0-15; actual="COLFIG3");: INPUT
COLFIG3$: IF COLFIG3$<>" " THEN COLFIG3=VAL(COLFIG3$)
IF COMPARA = 3 THEN
?" Color para error (0-15; actual="COLFIG4");: INPUT
COLFIG4$: IF COLFIG4$<>" " THEN COLFIG4=VAL(COLFIG4$)
END IF
FOR I=1 TO BANDAS
?" Color para la isobanda"I"(actual="COL(I)");: INPUT
COL$(I): IF COL$(I) <>" " THEN COL(I) =VAL(COL$(I))
NEXT I
GOTO 55000

CASE "2"
?:"?" ¿Cómo se desean las gráficas?
?" (1) Medio espesor; pared del molde a la derecha.
?" (2) Medio espesor; pared del molde a la izquierda (3D).
?" (3) Todo el espesor.

```

```

        GRAF$ = INPUT$(1): IF GRAF$ = "1" THEN GRAF$ = "" ELSE IF GRAF$ = "2"
THEN GRAF$ = "IZQ" ELSE IF GRAF$ = "3" THEN GRAF$ = "DOBLE"
        GOTO 55000

```

```

        CASE "3"
55301  ?::?"          Para temperatura:
        ?"              máximo actual = "MAXTHETA;: INPUT Z$: IF Z$<>" THEN
MAXTHETA = VAL(Z$)
        ?"              mínimo actual = "MINTHETA;: INPUT Z$: IF Z$<>" THEN
MINTHETA = VAL(Z$)
        IF MAXTHETA <= MINTHETA THEN 55301
55302  ?::?"          Para conversión:
        ?"              máximo actual = "MAXCONV ;: INPUT Z$: IF Z$<>" THEN
MAXCONV = VAL(Z$)
        ?"              mínimo actual = "MINCONV ;: INPUT Z$: IF Z$<>" THEN
MINCONV = VAL(Z$)
        IF MAXCONV <= MINCONV THEN 55302
55303  ?::?"          Para velocidad de generación:
        ?"              máximo actual = "MAXDTAX ;: INPUT Z$: IF Z$<>" THEN
MAXDTAX = VAL(Z$)
        ?"              mínimo actual = "MINDTAX ;: INPUT Z$: IF Z$<>" THEN
MINDTAX = VAL(Z$)
        IF MAXDTAX <= MINDTAX THEN 55303
        IF COMPARA = 3 THEN
55304  ?::?"          Para error:
        ?"              máximo actual = "MAXERROR;: INPUT; Z$: IF Z$<>" THEN
MAXERROR = VAL(Z$)
        ?"              mínimo actual = "MINERROR;: INPUT; Z$: IF Z$<>" THEN
MINERROR = VAL(Z$)
        IF MAXERROR <= MINERROR THEN 55304
        END IF
        GOTO 55000

```

```

        CASE "4"
        ?::?"          ¿Se desea graficar la temperatura de la pared? (s/n)"
        ?"              Actual = "GRAFPARED$: ZZ$ = INPUT$(1)
        IF ZZ$ <>" THEN GRAFPARED$ = ZZ$
        GOTO 55000

```

```

        CASE "5"
        ?::?"          ¿Cuánto tiempo se desea entre gráficas?"
        ?::?"          Especificar en segundos; actual= ";: ? USING
"##.##";SEGUNDOS
        INPUT;SEGUNDO$: IF SEGUNDO$ <>" THEN SEGUNDOS = VAL(SEGUNDO$)
        GOTO 55000

```

```

        CASE "6"
        ?::?"          ¿Se desea graficar en forma acumulada? (s/n)"
        ?"              Actual = "ACUMULADA$: ZZ$ = INPUT$(1)
        IF ZZ$ <>" THEN ACUMULADA$ = ZZ$
        GOTO 55000

```

```

        CASE "7"
        ?::?"          Valores actuales:"
        ?"              Factor de vista en X ="XFACT
        ?"              Factor de vista en Y ="YFACT
        ?::?"          ¿Qué factor de vista se desea en X? (0 - 380; sug: 256)";
        INPUT ZZ$: IF ZZ$ <> "" THEN XFACT = VAL(ZZ$)
        ?::?"          ¿Qué factor de vista se desea en Y? (0 - 117; sug: 91)";
        INPUT ZZ$: IF ZZ$ <> "" THEN YFACT = VAL(ZZ$)
        GOTO 55000

```

```

        CASE "8"
        ?::?"          Opacidad actual ="OPACIDAD/50
        ?"              Para gráfica 'rellena' use opacidad = 1"

```

```

        ? : INPUT "                ¿Qué factor de opacidad se desea? (0 - 1; sug:
.5)"; OPACIDAD: OPACIDAD = 50 * OPACIDAD

        IF OPACIDAD < 50 THEN KOLOR2 = COLFOND ELSE KOLOR2 = COLFIG
        IF OPACIDAD = 0 THEN ISOBANDAS$ = "": GOTO 55000
        ? : PRINT "                ¿Se desea mostrar isobandas? (s/n)": ISOBANDAS$ =
INPUT$(1)
        IF ISOBANDAS$ = "s" OR ISOBANDAS$ = "S" THEN DEFISO ELSE 55000

        DEFISO:
        'Definición de isobandas.
        COLFOND = 0: COLFIG = 15: COLFIG1 = 15: COLFIG2=15: COLFIG3=15:
COLFIG4=15
        ? : INPUT "                ¿Cuántas isobandas? (0-15; sug: 10)"; BANDAS
        ? : PRINT "                ¿De alta resolución? (s/n)"; ZZ$ = INPUT$(1)
        IF ZZ$ = "s" OR ZZ$ = "S" THEN ISOBANDAS$ = "alta"
        GOTO 55000

        CASE "9"
        ? : ? : ? "                ¿Se desean gráficas estereoscópicas? (s/n)
        ? "                Actual = "ESTEREO$
        ESTEREO$ = INPUT$(1)
        IF ESTEREO$ = "S" THEN ESTEREO$ = "s"
        GOTO 55000

        CASE ELSE: GOTO 53000

    END SELECT

RETURN

```

Anexo V

Resultados Numéricos

Comparación del Caso Adiabático

Se compararon los resultados del caso adiabático entre los diferentes métodos. Los resultados son prácticamente idénticos entre los diferentes métodos, por lo que se ve innecesario asentar aquí los resultados numéricos, que no son de interés en sí mismos, sino únicamente como materia de comparación.

A falta de una solución analítica, se compararon los resultados del caso adiabático respecto de un caso con tamaño de paso temporal menor ($\Delta\tau = 0.000625$), usando múltiplos de este tamaño de paso en tiempo. Estas corridas se hicieron para cuatro casos de diferentes calores de reacción (ΔT_{ad}) y los demás datos tomados de la tabla 1.2. Las corridas abarcaron el período de mayor generación de calor, hasta un nivel de conversión cercano al 100%, correspondiente al caso que se muestra en la figura 1.2. Se utilizaron además los siguientes valores iniciales: Temperatura inicial del sistema: 303 K; concentración inicial del reactivo, 2.6 kg m^{-3} ; espesor del molde 0.01 m; Número de Biot, 10^6 .

Los resultados fueron los siguientes:

Tabla A.5.1. Datos de las figuras 3.1 y 3.2 EPAM del caso adiabático en función del tamaño de paso temporal y del incremento de temperatura adiabático, respecto del caso con $\Delta\tau = 0.000625$						
ΔT_{ad} , K	$\Delta\tau = 0.00125$	$\Delta\tau = 0.0025$	$\Delta\tau = 0.005$	$\Delta\tau = 0.01$	$\Delta\tau = 0.02$	$\Delta\tau = 0.04$
72.9	-	-	0.12058244	0.35225981	0.77722333	1.50974957
109.40	-	0.17936675	0.52109071	1.14710961	2.22542627	3.93403972
145.85	0.28356698	0.81700912	1.78558142	3.43407410	6.00468394	diverge
182.32	0.59403103	1.66447040	3.50061500	6.41517400	diverge	diverge

Números de Biot Críticos en Función del Número de Divisiones Espaciales

Se realizó la determinación de los números de Biot críticos en función del número de divisiones espaciales (NINCZ), con diferentes valores de $\Delta\Theta_w$. El tamaño de paso en tiempo fue $\Delta\tau = 0.005$. Estos resultados fueron determinados utilizando las propiedades físicas que aparecen en la tabla 1.2. Se utilizaron además los siguientes valores iniciales: Temperatura inicial del sistema: 303 K; diferencia entre la temperatura adimensional inicial de la pared del molde y la del sistema, $\Delta\Theta_w$, según se indica en cada tabla. Concentración inicial del reactivo, 2.6 kg m^{-3} ; espesor del molde 0.01 m.

La determinación del valor del Bi_c se realizó del siguiente modo: en el caso del $Bi_c@50$, se analizaron visualmente los resultados *numéricos* de la temperatura de la pared en las iteraciones 45 a 50. Para determinar la existencia de oscilación se consideraron tres cifras significativas, incluyendo el efecto de redondeo de la cuarta cifra. Cuando la variación numérica en la cuarta cifra decimal en una iteración era menor que en la siguiente, se consideró que la amortiguación de la oscilación de la temperatura de la pared era suficiente.

En el caso del $Bi_c@0$ se aprovechó la función gráfica en dos dimensiones ofrecida por el programa de cómputo, particularmente el caso de temperatura en función del tiempo. Visualmente, en el monitor de la pantalla se determinaba si existía oscilación inicial. Según la definición de “oscilación” dada en el Capítulo III, se considera oscilación cuando cambia alternadamente *la pendiente* de la temperatura respecto del tiempo.

Además, en ambos casos se hicieron corridas hasta encontrar el valor del Bi_c con tres (en algunos casos con dos) cifras significativas.

Para la interpretación de las tablas siguientes es necesario considerar el siguiente código:

- *¹ Diverge, pero no por el Bi , sino porque $\Delta\tau/(\Delta Z)^2 >$ cierto límite crítico (Capítulo I).
- *² Este caso no diverge ni oscila a causa del valor de Bi .
- *³ Puede haber divergencia, pero no por oscilación debida al Bi , sino por exceso de generación de calor interna.
- *⁴ Sí oscila la temperatura de la pared, pero no por inestabilidad del método numérico, sino porque físicamente tiene sentido el aumento y disminución de temperatura.
- *⁵ No es definible porque se confunde con la oscilación que tiene sentido físicamente.

Tabla A.5.2. Datos de las figuras 3.5 a 3.9											
$\Delta\tau = 0.005, \Delta\Theta_w = 0.0$											
NINCZ	DAD		DAT	CN	COL	EFL		EF2		EFH	
	Fig. 3.4					Fig. 3.6		Fig. 3.7		Fig. 3.8	
	@50	@0				@50	@0	@50	@0	@50	@0
2	196	109	* ²	* ²	* ²	60.9	31.9	30.2	13.8	* ²	* ²
3	128	71.7	* ²	* ²	* ²	43.5	22.5	24.6	9.9	* ²	* ²
4	96.0	51.9	* ²	* ²	* ²	35.2	16.8	22.3	8.2	* ³	38.1
6	60.0	31.4	* ²	* ²	* ²	27.5	11.9	20.7	7.0	73.9	18.3
8	40.4	19.3	* ²	* ²	* ²	24.6	9.7	20.3	6.5	45.1	13.9
10	24.3	9.9	* ²	* ²	* ²	22.9	8.9	20.0	6.5	36.2	11.8
11	0		* ²	* ²	* ²						
12	* ¹		* ²	* ²	* ²	21.9	8.1	20.0	6.5	31.7	10.3
14	* ¹		* ²	* ²	* ²	21.1	8.0	19.9	6.5	29.1	9.9

Tabla A.5.3. Datos de las figuras 3.5 a 3.9												
$\Delta\tau = 0.005, \Delta\Theta_w = 0.1$												
NINCZ	DAD		DAT	CN		COL	EFL		EF2		EFH	
	Fig. 3.4			Fig. 3.5			Fig. 3.6		Fig. 3.7		Fig. 3.8	
	@50	@0		@50	@0		@50	@0	@50	@0	@50	@0
2	193	135	* ²	3290	240	* ²	59.5	34.6	29.3	14.1	* ³	41.0
3	127	89	* ²	2410	150	* ²	42.4	23.1	23.8	9.8	* ³	23.2
4	94.4	64.8	* ²	1910	110	* ²	34.2	17.4	21.3	7.8	* ³	16.8
6	59.2	33.1	* ²	1000	75	* ²	26.7	11.9	19.6	6.0	65.5	11.7
8	39.7	18.8	* ²	875	52	* ²	23.6	9.3	19.2	5.6	41.9	9.5
10	23.4	4.7	* ²	569	38	* ²	22.0	8.0	19.0	5.3	34.0	8.2
12	0		* ²	540	29	* ²	21.1	7.3	18.8	5.3	30.1	7.7
14	0		* ²	392	21	* ²	20.5	6.7	18.9	5.3	27.6	7.2

Tabla A.5.4. Datos de las figuras 3.5 a 3.9												
$\Delta\tau = 0.005, \Delta\Theta_w = 0.2$												
NINCZ	DAD		DAT	CN		COL	EFL		EF2		EFH	
	Fig. 3.4			Fig. 3.5			Fig. 3.6		Fig. 3.7		Fig. 3.8	
	@50	@0		@50	@0		@50	@0	@50	@0	@50	@0
2	195	132* ⁴	* ²	2920	* ⁴	* ²	59.4	* ⁴	29.4	15.2	* ³	-
3	128	86.3* ⁴	* ²	2120	* ⁴	* ²	42.4	* ⁴	23.6	10.1	* ³	27.6
4	96.5	63.1* ⁴	* ²	1680	* ⁴	* ²	34.1	19.1	21.3	7.9	* ³	18.9
6	59.5	55.2	* ²	884	* ⁴	* ²	26.7	12.5	19.6	6.0	65.1	12.6
8	39.8	21.4	* ²	772	57	* ²	23.6	9.6	19.2	5.5	41.2	9.8
10	22.8	2.0	* ²	672	42	* ²	22.0	8.2	18.9	5.3	33.6	8.4
12	0	0	* ²	476	31	* ²	21.0	7.2	18.8	5.2	29.6	7.7
14	0	0	* ²	448	24	* ²	20.3	6.7	18.7	5.1	27.4	7.2

Tabla A.5.5. Datos de las figuras 3.5 a 3.9												
$\Delta\tau = 0.005, \Delta\Theta_w = 0.3$												
NINCZ	DAD		DAT	CN		COL	EFL		EF2		EFH	
	Fig. 3.4			Fig. 3.5			Fig. 3.6		Fig. 3.7		Fig. 3.8	
	@50	@0		@50	@0		@50	@0	@50	@0	@50	@0
2	184	139* ⁴	* ²	2280	* ⁴	* ²	57.4	* ⁴	29.9	* ⁴	* ³	* ⁴
3	122	92.6* ⁴	* ²	1740	* ⁴	* ²	41.2	* ⁴	23.5	11.0	* ³	* ⁴
4	90.3	68.2* ⁴	* ²	1450	* ⁴	* ²	33.7		21.2	8.3	* ³	* ⁴
6	57.4	43.4* ⁴	* ²	1040	* ⁴	* ²	26.5	14.2	19.5	6.2	63.6	14.2
8	38.7	33.8	* ²	651	38	* ²	23.1	10.0	18.9	5.5	40.6	10.3
10	19.3	0.0	* ²	582	53	* ²	21.5	8.5	18.7	5.1	33.1	8.7
12	0	0	* ²	519	39	* ²	20.6	7.5	18.6	5.1	29.2	7.8
14	0	0	* ²	381	26	* ²	20.1	6.8	18.7	5.1	27.1	7.4

Tabla A.5.6. Datos de las figuras 3.5 a 3.9												
$\Delta\tau = 0.005, \Delta\Theta_w = 0.4$												
NINCZ	DAD		DAT	CN		COL	EFL		EF2		EFH	
	Fig. 3.4			Fig. 3.5			Fig. 3.6		Fig. 3.7		Fig. 3.8	
	@50	@0		@50	@0		@50	@0	@50	@0	@50	@0
2	182	122	* ²	2780		* ²	56.0		28.2		* ³	
3	119	81.5	* ²	1430		* ²	40.1		23.7		* ³	
4	88.2	61.0	* ²	1240		* ²	32.5		21.0		* ³	
6	55.3	38.4	* ²	939		* ²	26.0		19.3		62.4	
8	37.2	34.1	* ²	729		* ²	23.2		18.6		40.2	
10	0.0	0.0	* ²	499		* ²	21.5		18.6		32.7	
12	0	0	* ²	455		* ²	20.4		18.4		29.0	
14	0	0	* ²	414		* ²	19.9		18.4		26.8	

Tabla A.5.7. Datos de la figura 3.10 Valores promedios de $Bi_c@50$, obtenidos de los datos de las tablas A.5.1 a A.5.5							
NINCZ	DAD	DAT	CN	COL	EFL	EF2	EFH
2	190.0	* ²	2818	* ²	58.6	29.4	* ³
3	124.8	* ²	1925	* ²	41.9	23.8	* ³
4	93.08	* ²	1570	* ²	33.9	21.4	* ³
6	58.28	* ²	966	* ²	26.7	19.7	66.1
8	39.16	* ²	757	* ²	23.6	19.2	41.8
10	17.96	* ²	581	* ²	22.0	19.0	33.9
12	0	* ²	498	* ²	21.0	18.9	29.9
14	0	* ²	409	* ²	20.4	18.9	27.6

Números de Biot Críticos en Función del Incremento de Tiempo Adimensional ($\Delta\tau$)

Se realizó la determinación de los números de Biot críticos en función del incremento de tiempo adimensional ($\Delta\tau$), empleando como diferencia entre las temperaturas iniciales de los reactivos y la pared del molde los valores $\Delta\Theta_w = 0$ y $\Delta\Theta_w = 0.2$. El tamaño de paso en tiempo fue $\Delta\tau = 0.00125, 0.0025$ y 0.01 . Por tanto, los resultados de la sección anterior son complementarios de estos en el caso con $\Delta\tau = 0.005$. Estos resultados fueron determinados utilizando las propiedades físicas listadas en la tabla 1.2 y los valores iniciales mencionados en la sección anterior.

Tabla A.5.8. $Bi_c@50$ de los diversos métodos $\Delta\tau = 0.00125, \Delta\Theta_w = 0$							
NINCZ	DAD	DAT	CN ¹⁴	COL	EFL	EF2	EFH
2	790	* ²	17000	* ²	230	102	* ²
3	530	* ²	11000	* ²	160	73	* ²
4	400	* ²	8300	* ²	120	60	* ²
6	260	* ²	5700	* ²	87	49	* ²
8	190	* ²	4300	* ²	70	44	* ²
10	150	* ²	3400	* ²	61	43	330
12	120	* ²	2800	* ²	55	42	160
14	90	* ²	2300	* ²	52	41	110

Tabla A.5.9. $Bi_c@50$ de los diversos métodos $\Delta\tau = 0.00125, \Delta\Theta_w = 0.2$							
NINCZ	DAD	DAT	CN	COL	EFL	EF2	EFH
2	780	* ²	9200	* ²	220	99	* ³
3	515	* ²	7000	* ²	150	71	* ³
4	390	* ²	5600	* ²	120	58	* ³
6	250	* ²	3500	* ²	85	47	* ³
8	180	* ²	2400	* ²	68	42	* ³
10	140	* ²	2200	* ²	58	41	230
12	110	* ²	1700	* ²	53	39	130
14	95	* ²	1400	* ²	49	39	100

Tabla A.5.10. Datos de las figuras 3.11 a 3.14 Promedios de los $Bi_c@50$ de las dos tablas anteriores $\Delta\tau = 0.00125$							
NINCZ	DAD	DAT	CN	COL	EFL	EF2	EFH
	Fig. 3.11				Fig. 3.12	Fig. 3.13	Fig. 3.14
2	785	* ²	9200	* ²	225	101	* ³
3	523	* ²	7000	* ²	155	72	* ³
4	395	* ²	5600	* ²	120	59	* ³
6	255	* ²	3500	* ²	86	48	* ³
8	185	* ²	2400	* ²	69	43	* ³
10	145	* ²	2200	* ²	60	42	280
12	115	* ²	1700	* ²	54	41	145
14	93	* ²	1400	* ²	51	41	105

¹⁴ Los valores de Bi_c para el método de Crank-Nicolson son infinitos cuando $\Delta\Theta_w = 0$. Por tanto, para tener un caso con oscilación, se calcularon los valores con $\Delta\Theta_w = 0.1$.

Tabla A.5.11. $Bi_c@50$ de los diversos métodos $\Delta\tau = 0.0025, \Delta\Theta_w = 0$							
NINCZ	DAD	DAT	CN ¹⁵	COL	EFL	EF2	EFH
2	400	* ²	9200	* ²	110	54	* ²
3	266	* ²	6000	* ²	82	41	* ²
4	199	* ²	4200	* ²	64	35	* ²
6	128	* ²	2600	* ²	48	31	* ²
8	92	* ²	1500	* ²	40	29	129
10	69	* ²	1300	* ²	36	29	71
12	52	* ²	1200	* ²	34	29	59
14	37	* ²	1100	* ²	33	29	51

Tabla A.5.12. $Bi_c@50$ de los diversos métodos $\Delta\tau = 0.0025, \Delta\Theta_w = 0.2$							
NINCZ	DAD	DAT	CN	COL	EFL	EF2	EFH
2	397	* ²	5500	* ²	110	53	* ³
3	261	* ²	3200	* ²	81	40	* ³
4	196	* ²	2700	* ²	64	34	* ³
6	127	* ²	1800	* ²	47	30	* ³
8	91	* ²	1300	* ²	39	28	110
10	68	* ²	970	* ²	35	27	68
12	51	* ²	920	* ²	33	27	55
14	35	* ²	770	* ²	31	27	47

Tabla A.5.13. Datos de las figuras 3.11 a 3.14 Promedios de los $Bi_c@50$ de las dos tablas anteriores $\Delta\tau = 0.0025$							
NINCZ	DAD	DAT	CN	COL	EFL	EF2	EFH
	Fig. 3.11				Fig. 3.12	Fig. 3.13	Fig. 3.14
2	399	* ²	5500	* ²	110	54	* ³
3	264	* ²	3200	* ²	82	41	* ³
4	198	* ²	2700	* ²	64	35	* ³
6	128	* ²	1800	* ²	48	31	* ³
8	92	* ²	1300	* ²	40	29	120
10	69	* ²	970	* ²	36	28	73
12	52	* ²	920	* ²	34	28	57
14	36	* ²	770	* ²	32	28	49

¹⁵ Ver nota 1 del presente Anexo.

Tabla A.5.14. $Bi_c@50$ de los diversos métodos $\Delta\tau = 0.01, \Delta\Theta_w = 0$							
NINCZ	DAD	DAT	CN ¹⁶	COL	EFL	EF2	EFH
2	101	* ²	2200	* ²	33	18	
3	65	* ²	1400	* ²	24	15	* ²
4	47	* ²	1000	* ²	20	14	61
6	27	* ²	480	* ²	17	14	30
8	0	* ²	410	* ²	16	14	23
10	0	* ²	360	* ²	15	14	20
12	0	* ²	320	* ²	15	14	19
14	0	* ²	290	* ²	14	14	18

Tabla A.5.15. $Bi_c@50$ de los diversos métodos $\Delta\tau = 0.01, \Delta\Theta_w = 0.2$							
NINCZ	DAD	DAT	CN	COL	EFL	EF2	EFH
2	97	* ²	1400	* ²	31	17	* ³
3	63	* ²	900	* ²	24	15	* ³
4	45	* ²	620	* ²	20	14	59
6	26	* ²	440	* ²	16	13	27
8	0	* ²	340	* ²	15	13	21
10	0	* ²	250	* ²	14	13	19
12	0	* ²	190	* ²	14	13	18
14	0	* ²	170	* ²	14	13	17

Tabla A.5.16. Datos de las figuras 3.11 a 3.15 Promedios de los $Bi_c@50$ de las dos tablas anteriores $\Delta\tau = 0.01$							
NINCZ	DAD	DAT	CN	COL	EFL	EF2	EFH
	Fig. 3.10				Fig. 3.12	Fig. 3.13	Fig. 3.14
2	99	* ²	1400	* ²	32	18	* ³
3	64	* ²	900	* ²	24	15	* ³
4	46	* ²	620	* ²	20	14	60
6	27	* ²	440	* ²	17	14	29
8	0	* ²	340	* ²	16	14	22
10	0	* ²	250	* ²	15	14	20
12	0	* ²	190	* ²	15	14	19
14	0	* ²	170	* ²	14	14	18

¹⁶ Ver nota 1 del presente Anexo.

Error Relativo entre los Diferentes Métodos

Comparación con la Solución Analítica

Las comparaciones se hicieron con los siguientes datos iniciales: Temperatura inicial del sistema: 303 K; diferencia entre la temperatura adimensional inicial de la pared del molde y la del sistema, $\Delta\Theta_w = 0$. Concentración inicial del reactivo, 2.6 kg m^{-3} ; número de Biot = 10^6 ; espesor del molde 0.01 m. El error porcentual absoluto medio (EPAM) se calculó con el programa de cómputo, tomando los resultados de todos los nodos de cada corrida.

La pared isotérmica se establece por medio de un número de Biot muy grande (cfr. Capítulo I). En estas condiciones, el efecto de oscilación en la pared presentado por los métodos de diferencias finitas hacia adelante, elementos finitos lineales y elementos finitos de segundo grado, hace que éstos queden eliminados porque es imposible con esos métodos y con el número de Biot como parámetro para mantener la temperatura de la pared constante, resolver numéricamente el caso que tiene solución analítica.

Las tablas siguientes muestran los errores porcentuales absolutos medios (EPAM) obtenidos mediante el programa de cómputo, al comparar los resultados de cada método, considerando todos los nodos, respecto de la solución analítica en esos mismos nodos en distancia y tiempo. Muestran también los errores porcentuales máximos, graficados en la figura 3.17 del Capítulo III.

Tabla A.5.17. Datos de la figura 3.16 EPAM de varios métodos numéricos respecto de la solución analítica $\Delta\tau = 0.005$, NINCT = 50				
NINCZ	DAT	CN	COL	EFH
2	0.4516	0.4010	0.7426	0.0558
3	0.2755	0.2176	0.0813	0.0539
4	0.1922	0.1296	0.0658	0.0493
6	0.1307	0.0647	0.0701	-
8	0.1038	0.0354	0.0684	-
10	0.0928	0.0236	0.0699	-
12	0.0878	0.0180	-	-
14	0.0825	0.0119	-	-

Tabla A.5.18. Datos de la figura 3.16
EPAM de varios métodos numéricos
respecto de la solución analítica

$\Delta\tau = 0.0025$, NINCT = 100

NINCZ	DAT	CN	COL	EFH
2	0.4230	0.3978	0.7431	0.0335
3	0.2455	0.2167	0.0612	0.0355
4	0.1600	0.1288	0.0345	0.0246
6	0.0976	0.0648	0.0373	0.0364
8	0.0694	0.0354	0.0341	-
10	0.0583	0.0238	0.0354	-
12	0.0530	0.0183	-	-
14	0.0473	0.0121	-	-

Tabla A.5.19. Datos de la figura 3.17
Error máximo de varios métodos numéricos
respecto de la solución analítica

$\Delta\tau = 0.005$, NINCT = 50

NINCZ	DAT	CN	COL	EFH
2	-1.1758	-1.0529	-0.9658	-0.1897
3	-0.6240	-0.4933	-0.2560	-0.1347
4	-0.4161	-0.2823	-0.1376	-0.1358
6	-0.2627	-0.1268	-0.1373	-
8	-0.2081	-0.0715	-0.1373	-
10	-0.1827	-0.0567	-0.1373	-
12	-0.1689	-0.0317	-	-
14	-0.1605	-0.0378	-	-

Tabla A.5.20. Datos de la figura 3.17
Error máximo de varios métodos numéricos
respecto de la solución analítica

$\Delta\tau = 0.005$, NINCT = 100

NINCZ	DAT	CN	COL	EFH
2	-1.1146	-1.0530	-0.9289	-0.1574
3	-0.5591	-0.4935	-0.2650	-0.0855
4	-0.3496	-0.2825	-0.0692	-0.0787
6	-0.1952	-0.1270	-0.0690	-0.1493
8	-0.1403	-0.0717	-0.0533	-
10	-0.1147	-0.0710	-0.0710	-
12	-0.1007	-0.0319	-	-
14	-0.0923	-0.0575	-	-

Comparación del Caso con Pared Isotérmica

Tabla A.5.21. Datos de la figura 3.19
EPAM de la temperatura obtenida por varios
métodos con $\Delta\tau = 0.01$; NICNT = 13
 respecto de CN con 12 divisiones espaciales
 $\Delta\tau = 0.0025$; NINCT = 50

NINCZ	DAT	CN	COL	EFH
2	2.5935	2.3748	2.2852	2.7659
3	2.6836	2.4161	2.5672	2.7123
4	2.7498	2.4588	2.6602	-
6	2.8197	2.5092	2.7699	-
12	2.8936	2.5627	-	-

Tabla A.5.22. Datos de la figura 3.19
EPAM de la temperatura obtenida por varios
métodos con $\Delta\tau = 0.005$; NICNT = 25
 respecto de CN con 12 divisiones espaciales
 $\Delta\tau = 0.0025$; NINCT = 50

NINCZ	DAT	CN	COL	EFH
2	1.1374	1.0156	1.2220	1.3755
3	1.0821	0.9515	1.0016	1.1765
4	1.0823	0.9375	0.9989	1.1096
6	1.0776	0.9132	1.0253	-
12	1.0823	0.8976	-	-

Tabla A.5.23. Datos de la figura 3.19
EPAM de la temperatura obtenida por varios
métodos con $\Delta\tau = 0.0025$; NINCT = 50
 respecto de CN con 12 divisiones espaciales
 $\Delta\tau = 0.0025$; NINCT = 50

NINCZ	DAT	CN	COL	EFH
2	0.3681	0.3051	0.9062	0.6315
3	0.256	0.2042	0.2654	0.3559
4	0.2054	0.1445	0.1219	0.247
6	0.1439	0.0669	0.0869	0.1733
12	0.1048	0	-	-

Comparación del Caso General con $Bi = 5$

Tabla A.5.24. Datos de la figura 3.23 EPAM de la temperatura obtenida por varios métodos con $\Delta\Theta_w = 0.3$, $\Delta\tau = 0.005$, NINCT = 25 respecto de CN con 12 divisiones espaciales y $\Delta\tau = 0.00125$							
NINCZ	DAD	DAT	CN	COL	EFL	EF2	EFH
2	3.1252	3.0737	3.0831	2.9375	1.3396	1.7454	1.1733
3	2.4121	2.4380	2.3978	2.0446	1.2375	-	1.2143
4	2.0170	2.1364	2.0391	1.8199	1.2673	1.4005	1.2512
6	1.6039	1.9162	1.7409	1.7789	1.3144	1.3836	1.3042
12	-	1.8033	1.6070	-	1.3624	1.3829	1.3525

Tabla A.5.25. Datos de la figura 3.24 EPAM de la temperatura obtenida por varios métodos con $\Delta\Theta_w = 0.3$, $\Delta\tau = 0.0025$, NINCT = 50 respecto de CN con 12 divisiones espaciales y $\Delta\tau = 0.00125$							
NINCZ	DAD	DAT	CN	COL	EFL	EF2	EFH
2	2.3307	2.2743	2.2969	2.7517	1.1827	1.3794	0.8452
3	1.5969	1.5686	1.5751	1.1137	0.6902	-	0.6058
4	1.1893	1.1970	1.1816	0.8430	0.5843	0.6498	0.5630
6	0.7682	0.8518	0.7928	0.7719	0.5481	0.5929	0.5572
12	-	0.6860	0.5711	-	0.5572	0.5775	0.5610

Tabla A.5.26. Datos de la figura 3.25 EPAM de la temperatura obtenida por varios métodos con $\Delta\Theta_w = 0.3$, $\Delta\tau = 0.00125$, NINCT = 100 respecto de CN con 12 divisiones espaciales y $\Delta\tau = 0.00125$							
NINCZ	DAD	DAT	CN	COL	EFL	EF2	EFH
2	1.9792	1.9600	1.9681	2.7750	1.3972	1.4006	1.1725
3	1.1891	1.1837	1.1838	0.7888	0.8323	-	0.8320
4	0.7715	0.7748	0.7681	0.4203	0.5851	0.4682	0.6461
6	0.3707	0.3713	0.3574	0.3433	0.4053	0.3565	0.4792
12	0.0989	0.0920	0.0000	-	0.3283	0.3204	0.3583

Tabla A.5.27. Datos de la figura 3.26 EPAM de la temperatura obtenida por varios métodos con $\Delta\Theta_w = 0$, $\Delta\tau = 0.005$, NINCT = 25 respecto de CN con 12 divisiones espaciales y $\Delta\tau = 0.00125$							
NINCZ	DAD	DAT	CN	COL	EFL	EF2	EFH
2	1.9643	1.7871	1.8671	2.8934	1.3876	1.7311	2.6051
3	1.4683	1.5550	1.4941	1.9266	1.5333	-	2.1063
4	1.3959	1.5625	1.4680	1.8956	1.5994	1.6811	1.9236
6	1.4043	1.6411	1.5132	1.9192	1.6520	1.6854	1.7927
12	diverge	1.7743	1.6222	-	1.6899	1.6978	1.7205

Tabla A.5.28. Datos de la figura 3.28 EPAM de la temperatura obtenida por varios métodos con $\Delta\Theta_w = 0$, $\Delta\tau = 0.0025$, NINCT = 50 respecto de CN con 12 divisiones espaciales y $\Delta\tau = 0.00125$							
NINCZ	DAD	DAT	CN	COL	EFL	EF2	EFH
2	1.5114	1.4050	1.4556	2.1722	0.5670	0.8719	1.7512
3	0.8361	0.7865	0.8061	0.9005	0.6202	-	1.1980
4	0.5909	0.6168	0.5941	0.8244	0.6543	0.7378	0.9905
6	0.4909	0.5819	0.5269	0.8336	0.6850	0.7188	0.8346
12	0.4989	0.6565	0.5729	-	0.7023	0.7098	0.7377

Tabla A.5.29. Datos de la figura 3.28 EPAM de la temperatura obtenida por varios métodos con $\Delta\Theta_w = 0$, $\Delta\tau = 0.00125$, NINCT = 100 respecto de CN con 12 divisiones espaciales y $\Delta\tau = 0.00125$							
NINCZ	DAD	DAT	CN	COL	EFL	EF2	EFH
2	1.3612	1.2780	1.3188	1.9190	0.4520	0.4957	1.2889
3	0.7184	0.6357	0.6747	0.4269	0.2710	-	0.7073
4	0.4616	0.3778	0.4170	0.2528	0.2044	0.2292	0.4867
6	0.2422	0.1579	0.1958	0.2499	0.1714	0.1970	0.3175
12	0.0476	0.0467	0.0000	-	0.1692	0.1765	0.2072